

修 士 論 文

題 目 鞍点型問題の数値解法と精度保証

氏 名 橋本 弘治

平成 12 年度入学

島根大学大学院総合理工学研究科修士課程 数理・情報システム 学専攻 数理解析 講座

指導教官 陳 小君

平成 年 月 日受理

目 次

1	序	1
2	鞍点型問題に対する Uzawa 法	2
2.1	Uzawa 法	2
2.2	Inexact Uzawa 法	3
2.3	前処理	4
2.4	Uzawa 法に対する Orthomin(1) 法	5
3	鞍点型問題の精度保証	11
4	モデル問題	15
5	数値結果	17
5.1	数値解法	18
5.2	精度保証	22
5.3	まとめ	23
	参考文献	24
	付録 要素行列の計算	

1 序

この論文は、次の鞍点型問題における研究の結果である。

$$\begin{pmatrix} A & B^T \\ B & -C \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix}. \quad (1.1)$$

但し、 A は $n \times n$ 正定値対称行列、 B は $m \times n$ 行列、 C は $m \times m$ 半正定値対称行列であり、 x と f は n 次ベクトル、 y と g は m 次ベクトルである ($n \geq m$)。

20 世紀後半から 21 世紀にかけての計算機の飛躍的な発展により、微分方程式などの無限次元における複雑な数学的モデルの解析が、その多くが有限次元の簡素化された数学的モデルに離散化して計算を行うことができるようになった。そこで、一連の流れの中で既に離散化された連立線形方程式に注目する時、一般に反復法を用いて近似解を求めていくことは良く知られていることである。その時、問題となることは行列がどのような性質を有しているかということである。例えば、全体系の行列が正定値性を持っているならば、その問題に対する反復法の収束定理はよく知られていることであり、その改良も様々に成されている。しかし、(1.1) の行列のような不定性を持つ行列の場合では、正定値性を持つ場合と同じ手法では理論的な保証ができないのである。

本論文では、鞍点型問題 (1.1) の数値解法によく用いられる Uzawa 法と精度保証について述べていく。

鞍点型問題 (1.1) を $Hx = b$ とおく。但し、

$$H = \begin{pmatrix} A & B^T \\ B & -C \end{pmatrix}, \quad x = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix}$$

である。この時、 H の正則性についての十分条件は、

$$S := BA^{-1}B^T + C$$

が正則行列となることである。

$$H^{-1} = \begin{pmatrix} A & B^T \\ B & -C \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} I & -A^{-1}B^T \\ O & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A^{-1} & O \\ S^{-1}BA^{-1} & -S^{-1} \end{pmatrix}.$$

そこで、(1.1) の係数行列 B において $\text{rank}(B) = m$ を仮定する。この時、 S は正定値対称行列となる。

これからの議論の為に次の定義を示しておく。

定義 1.1 連立線形方程式 $Hx = b$ において、残差と誤差を次により定義する。

$$\text{残差} : r_k := b - Hx_k, \quad \text{誤差} : e_k := H^{-1}b - x_k.$$

定義 1.2 行列 H のスペクトル半径を次により定義する。

$$H \text{ のスペクトル半径} : \rho(H) := \max \{ |\lambda| : \lambda \text{ は } H \text{ の固有値} \}.$$

また、 H の最大と最小の固有値をそれぞれ $\lambda_{\max}(H)$ と $\lambda_{\min}(H)$ 、または $\lambda_{\max}$ と $\lambda_{\min}$ と表す。

2 章では exact, inexact Uzawa 法について紹介し、Orthomin(1) 法を用いた Uzawa 法の改良について述べる。3 章では一般によく用いられる精度保証付き数値計算法について示し、鞍点型問題 (1.1) の新しい精度保証の定理を与える。また、4 章ではモデル問題としてストークス方程式の有限要素法を用いた離散化について紹介し、5 章ではモデル問題に対しての数値実験の結果を示してある。

本論文の新たに提案している鞍点型問題の精度保証については、2001 年 12 月 19-21 日に龍谷大学瀬田キャンパス REC ホールで行われた応用数学合同研究集会で発表したものである [5]。

2 鞍点型問題に対する Uzawa 法

鞍点型問題 (1.1) を全体系として逐次反復法で解く場合、係数行列の不定性から必要となる収束条件を満たしているか否かを判断することが非常に難しい。つまり、理論的な保証が困難である。しかし、正定値行列に対する数値解法が様々に研究されていることを考えれば、行列 A が正定値という利点は利用したい。そこで、鞍点型問題の反復計算に良く用いられる Uzawa 法を紹介する。

2.1 Uzawa 法

鞍点型問題 (1.1) において、Uzawa アルゴリズムは次のようになる。

アルゴリズム 2.1 (The Uzawa Algorithm)

```
Given an initial guess  $y_0$ 
For  $k = 0$  until convergence
Solve  $Ax_{k+1} = f - B^T y_k$ 
Compute  $y_{k+1} = y_k + \alpha(Bx_{k+1} - Cy_k - g)$      $\alpha$  : parameter
```

アルゴリズム 2.1 の上式において、逆行列を用いて x_{k+1} を消去すると次の反復式を得る。

任意の初期ベクトル y_0 に対して、

$$\begin{aligned} y_{k+1} &= y_k + \alpha(BA^{-1}f - g - (BA^{-1}B^T + C)y_k) \\ &= (I - \alpha S)y_k + \alpha(BA^{-1}f - g), \quad k = 0, 1, \dots \end{aligned} \quad (2.1)$$

初めに、この場合について考察する。

(1.1) の一意解 (x^*, y^*) と (2.1) の近似解 (x_k, y_k) とのそれぞれの誤差 $e_k^x = x^* - x_k$ と $e_k^y = y^* - y_k$ は次を満たす。

$$e_k^x = A^{-1}B^T e_k^y, \quad e_k^y = (I - \alpha S)e_{k-1}^y.$$

よって、この誤差ノルムは次により評価される。

$$\begin{aligned} \|e_k^x\|_2 &\leq \|I - \alpha S\|_2^k \|A^{-1}B^T\|_2 \|e_0^y\|_2, \\ \|e_k^y\|_2 &\leq \|I - \alpha S\|_2^k \|e_0^y\|_2. \end{aligned}$$

(2.1) は $Sy = BA^{-1}f - g$ に fixed-parameter first-order Richardson 法を適用したものに対応している。また、 $\text{rank}(B) = m$ の仮定より S は正定値対称行列である。ゆえに、(2.1) の収束性については次の補題により保障される。

補題 2.1 S を正定値対称行列とする。連立線形方程式 $Sy = \hat{g}$ において、 $\lambda_{\max}$ と $\lambda_{\min}$ をそれぞれ S の最大と最小の固有値とする。この時、 $0 < \alpha < 2/\lambda_{\max}$ ならば fixed-parameter first-order Richardson 法は $Sy = \hat{g}$ の一意解に収束する。また、 α の最適値は $\alpha_{\text{opt}} = 2/(\lambda_{\max} + \lambda_{\min})$ であり次式を満たす。

$$\|I - \alpha_{\text{opt}} S\|_2 = \frac{\text{cond}(S) - 1}{\text{cond}(S) + 1} < 1.$$

但し、 $\text{cond}(S) = \lambda_{\max}/\lambda_{\min}$ は S の条件数である。

このように固定されたパラメータを用いた緩和法では行列の固有値が関係してくる。しかし、大きな次元の行列の固有値を求めることはとても難しい。従って、この場合の固有値の推定の為に次の補題を紹介する。

補題 2.2 [7]. S を $m \times m$ 対称行列とする. そして, $\text{ps}(S)$ を S の $m' \times m'$ 主座小行列 (principal submatrix) として, $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_m$ を S の固有値, $\mu_1 \leq \mu_2 \leq \dots \leq \mu_{m'}$ を $\text{ps}(S)$ の固有値とする. この時, それぞれの固有値は次を満足する.

$$\lambda_i \leq \mu_i \leq \lambda_{i+m-m'}, \quad i = 1, 2, \dots, m'.$$

さて, (2.1) への変形には A^{-1} が必要となる. しかし, 逆行列の計算はとても難しい. 確かに, 内反復は外反復で起こる各反復での退化なしに計算を行うことができるが, 鞍点型問題においては外反復を用いることが計算を行う上では理論的である. 当然, 内反復と比較すると計算コストや反復回数などは多量となる. 但し, Uzawa 法の収束速度は先に定義した S によって決まるものである. 一般には, 同様の離散化方法で生じる行列は次元が大きくなるほど条件数が悪くなることは良く知られている. しかし, S の定義から分かるように場合によっては A^{-1} の影響によりこのスピードがかなり抑えられるということも起きてくる. このようなことから Uzawa 法は収束においてとても安定した方法であると言える.

Uzawa 法の各反復は $Ax_{k+1} = f - B^T y_k$ の解を必要としている. しかし, このシステムが厳密 (exact) に解けないのであれば, ある程度の不確かさ (inexact) を残したままに解く inexact Uzawa アルゴリズムを構成して収束させることを考えることが必要となる.

2.2 Inexact Uzawa 法

この節では, inexact Uzawa アルゴリズムの収束性について紹介していく. 鞍点型問題 (1.1) において, inexact Uzawa アルゴリズムは次のようになる.

アルゴリズム 2.2 (The inexact Uzawa Algorithm)

Given an initial guess y_0
 For $k = 0$ until convergence
 Compute x_{k+1} such that $Ax_{k+1} = f - B^T y_k + r_k^x$
 Compute $y_{k+1} = y_k + \alpha(Bx_{k+1} - Cy_k - g)$ α : parameter

ここに, r_k^x は $Ax_{k+1} = f - B^T y_k$ の残差: $r_k^x = f - B^T y_k - Ax_{k+1}$ であり,

$$\|r_k^x\|_2 < \tau \|Bx_k - Cy_{k-1} - g\|_2, \quad k = 1, 2, \dots \quad (2.2)$$

と選ぶことが自然である. 但し, $\tau > 0$ はパラメータである. また, (1.1) の一意解 (x^*, y^*) とアルゴリズム 2.2 の近似解 (x_k, y_k) との誤差をそれぞれ $e_k^x := x^* - x_k$, $e_k^y := y^* - y_k$ とすると (2.2) の右辺は $\tau \|Be_k^x - Ce_{k-1}^y\|_2$ と等しいことが分かる.

数式の簡略化の為に次の記号を採用する.

$$\rho = \|I - \alpha S\|_2, \quad \eta = \tau \|BA^{-1}\|_2.$$

1994 年に Elman と Golub はアルゴリズム 2.2 の収束性と誤差評価について次の結果を与えた [6].

補題 2.3 [6]. アルゴリズム 2.2 に結び付けられた誤差は次を満足する.

$$\|Be_k^x - Ce_{k-1}^y\|_2 \leq c\tilde{\rho}^k \quad k = 2, 3, \dots$$

但し, $\tilde{\rho}$ は次式であり c は k に独立した定数である.

$$\tilde{\rho} = \rho + \eta + \frac{1}{2}(\rho + \eta) \left(\sqrt{1 + 4\eta/(\rho + \eta)^2} - 1 \right).$$

これはあくまで残差の評価である。しかし、結果としては e_k^x や e_k^y の評価に用いることができる。

系 2.1 [6]. アルゴリズム 2.2 に結び付けられた誤差 $e_k^y = y^* - y_k$ は次を満足する。

$$\|e_k^y\|_2 < \rho^{k-2} \|e_2^y\|_2 + \tilde{c} \tilde{\rho}^k, \quad k = 3, 4, \dots \quad (2.3)$$

但し, $\tilde{c} = \alpha \tau c \|BA^{-1}\|_2 / (\tilde{\rho} - \rho)$ は k に独立した定数である。

最後に, 補題 2.3 と系 2.1 より e_k^x の評価を導く。

系 2.2 [6]. アルゴリズム 2.2 に結び付けられた誤差 $e_k^x = x^* - x_k$ は次を満足する。

$$\|e_k^x\|_A < \tilde{c}_1 \tilde{\rho}^k, \quad \|e_k^x\|_2 < \tilde{c}_2 \tilde{\rho}^k, \quad k = 3, 4, \dots$$

但し, $\tilde{c}_1, \tilde{c}_2$ は k に独立した定数である。

注意 2.1 (2.2) の打ち切り基準におけるアルゴリズム 2.2 が, (1.1) の一意解に収束する十分条件は次である。

$$\rho + 2\eta < 1.$$

これまでの結果から分かるように, Inexact Uzawa 法は exact の場合程の厳密さが無くても一意解への収束が言えるものである。しかし, ここでの結果は (2.3) の $\|e_2^y\|_2$ が計算できない為にこのままでは計算による評価を行うことができない。この問題は 3 章で考えることにする。

2.3 前処理

この節では, exact もしくは inexact Uzawa アルゴリズムに前処理を適用していく。そこで, $Q = LL^T$ を $\dim(Q) = \dim(BA^{-1}B^T)$ である正定値対称行列とする。

この時, (2.1) に次のように前処理を適用する。

$$\left[\begin{pmatrix} I & O \\ O & L^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B^T \\ B & -C \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & O \\ O & L^{-T} \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} x \\ L^T y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f \\ L^{-1} g \end{pmatrix}. \quad (2.4)$$

(2.4) に Uzawa 法を適応して得られる $\hat{y}_k$ は $\hat{y} = L^T y$ に近づくことは前節より分かる。よって, $y_k = L^{-1} \hat{y}_k$ とする前処理 Uzawa アルゴリズムは次のようになる。

アルゴリズム 2.3 (The preconditioned Uzawa Algorithm)

Given an initial guess y_0
 For $k = 0$ until convergence
 Compute x_{k+1} such that $Ax_{k+1} = f - B^T y_k$
 Compute $y_{k+1} = y_k + \alpha Q^{-1} (Bx_{k+1} - Cy_k - g)$ α : parameter

inexact の場合は, 前と同様に $Ax_{k+1} = f - B^T y_k + r_k^x$ とする。(2.2) に即して,

$$\|r_k^x\|_2 < \tau \|Bx_k - Cy_{k-1} - g\|_{Q^{-1}}, \quad k = 1, 2, \dots \quad (2.5)$$

と選ぶことが自然である。但し, $\tau > 0$ はパラメータである。ここで,

$$\rho_Q = \|I - \alpha L^{-1} S L^{-T}\|_2, \quad \eta_Q = \tau \|L^{-1} B A^{-1}\|_2$$

とすれば, 前の補題と系により次の結果を導く。

補題 2.4 [6]. アルゴリズム 2.3 に結び付けられた誤差は次を満足する.

$$\|e_k^y\|_Q \leq \rho_Q^k \|e_0^y\|_Q, \quad \|Be_{k+1}^x - Ce_k^y\|_{Q^{-1}} \leq \rho_Q^k \|Be_1^x - Ce_0^y\|_{Q^{-1}}.$$

そして, (2.5) の打ち切り基準におけるアルゴリズム 2.3 に結び付けられた誤差は次を満足する.

$$\begin{aligned} \|Be_k^x - Ce_{k-1}^y\|_{Q^{-1}} &\leq c_Q \tilde{\rho}_Q^k, & k = 2, 3, \dots, \\ \|e_k^y\|_Q &< \rho_Q^{k-2} \|e_2^y\|_Q + \tilde{c}_Q \tilde{\rho}_Q^k, & k = 3, 4, \dots, \\ \|e^x\|_A &< \tilde{c}_{Q,1} \tilde{\rho}_Q^k, \quad \|e_k^x\|_2 < \tilde{c}_{Q,2} \tilde{\rho}_Q^k, & k = 3, 4, \dots. \end{aligned}$$

但し, $\tilde{\rho}_Q$ は次式であり $c_Q, \tilde{c}_Q$ そして $\tilde{c}_{Q,1}, \tilde{c}_{Q,2}$ は k に独立した定数である.

$$\tilde{\rho}_Q = \rho_Q + \eta_Q + \frac{1}{2}(\rho_Q + \eta_Q) \left(\sqrt{1 + 4\eta_Q/(\rho_Q + \eta_Q)^2} - 1 \right).$$

2.4 Uzawa 法に対する Orthomin(1) 法

初めに, Orthomin(1) 法と最速降下法について述べる.

連立線形方程式 $Sy = \hat{g}$ において, パラメータ α_k を用いて次により反復式を定義する.

$$y_{k+1} = y_k + \alpha_k(\hat{g} - Sy_k), \quad k = 0, 1, \dots \quad (2.6)$$

この時, 残差 $r_{k+1}^y := \hat{g} - Sy_{k+1}$ は $r_{k+1}^y = r_k^y - \alpha_k Sr_k^y$ を満足している. よって, 次の係数を選ぶことにより r_{k+1}^y の 2-ノルム: $\|r_{k+1}^y\|_2 = (r_{k+1}^y, r_{k+1}^y)^{1/2}$ は最小となる.

$$\alpha_k = \frac{(r_k^y, Sr_k^y)}{(Sr_k^y, Sr_k^y)}. \quad (2.7)$$

また S が対称行列の場合, 誤差 $e_{k+1}^y := y_{k+1} - S^{-1}\hat{g}$ は $e_{k+1}^y = e_k^y - \alpha_k r_k^y$ を満足している. ゆえに, 次の係数を選ぶことにより e_{k+1}^y の S -ノルム: $\|e_{k+1}^y\|_S = (e_{k+1}^y, Se_{k+1}^y)^{1/2}$ は最小となる.

$$\alpha_k = \frac{(e_k^y, Sr_k^y)}{(r_k^y, Sr_k^y)} = \frac{(r_k^y, r_k^y)}{(r_k^y, Sr_k^y)}. \quad (2.8)$$

(2.7) を用いた (2.6) は Orthomin(1) 法と呼ばれる. また, (2.8) を用いた (2.6) は最速降下 (Steepest Descent) 法と呼ばれる.

注意 2.2 Orthomin(1) 法は任意の正則行列の場合に用いることができる.

Orthomin(1) 法と最速降下法の収束性は次の補題により保障される.

定義 2.1 $S \in \Re^{m \times m}$ の field of value を次により定義する.

$$S \text{ の field of value : } \mathfrak{F}(S) := \left\{ \frac{y^T Sy}{y^T y} : y \in \Re^m \right\}.$$

補題 2.5 [7]. 任意の初期ベクトルにおいて, Orthomin(1) 法の残差の 2-ノルムが破綻することなく単調減少する必要十分条件は $0 \notin \mathfrak{F}(S^T)$ である.

注意 2.3 最速降下法は, 正定値でない $0 \notin \mathfrak{F}(S^T)$ である対称行列であれば破綻することなく計算できるが, 誤差の S -ノルムが単調減少するとは言えない.

ここからは, exact の場合について考えていく. また, inexact の場合においては 2.2 節と 2.3 節に帰着するものとし, ここでは特に Orthomin(1) 法の場合について述べることにする.

アルゴリズム 2.1 の下式において $y_{k+1} = y_k + \alpha(Bx_{k+1} - Cy_k - g)$ を次のように改良する.

$$y_{k+1} = y_k + \alpha_k(Bx_{k+1} - Cy_k - g). \quad (2.9)$$

ここで, $r_k^y = (Bx_{k+1} - Cy_k - g)$ とすると r_{k+1}^y は次を満たす.

$$r_{k+1}^y = r_k^y - \alpha_k Sr_k^y. \quad (2.10)$$

$\alpha_k = \alpha$ と固定した場合, (2.9) は (2.1) と同値である. (2.9) に Orthomin(1) 法を適用すると, α_k を (2.7) とすれば r_{k+1}^y の 2-ノルムは最小となる. しかし, $S = BA^{-1}B^T + C$ から A^{-1} の計算は一般には難しい. そこで, 次の線形システムを解くことにより Sr_k^y を近似的に求めることにする.

$$Aw = B^T r_k^y. \quad (2.11)$$

すなわち, (2.11) で得られた近似解を w_k としてその時の残差を δ_k とすると,

$$Aw_k = B^T r_k^y + \delta_k$$

となる. よって, w_k に B を掛けて Cr_k^y を加えると次のようになる.

$$\begin{aligned} Bw_k + Cr_k^y &= BA^{-1}B^T r_k^y + BA^{-1}\delta_k + Cr_k^y \\ &= Sr_k^y + BA^{-1}\delta_k. \end{aligned}$$

ゆえに, $Bw_k + Cr_k^y$ は Sr_k^y の近似値でありその誤差は次である.

$$\|Bw_k + Cr_k^y - Sr_k^y\|_2 \leq \|BA^{-1}\|_2 \|\delta_k\|_2$$

もちろん, Sr_k^y により近いものを求めるためには (2.11) を厳密に解く必要がある.

(2.11) の残差 δ_k のノルムを十分小さくに解く時, 得られた近似ベクトル $\mathbf{r}_k = Bw_k + Cr_k^y$ を用いて

$$\alpha_k = \frac{(r_k^y, \mathbf{r}_k)}{(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_k)} \approx \frac{(r_k^y, Sr_k^y)}{(Sr_k^y, Sr_k^y)}$$

とする. この時, r_{k+1}^y は次を満たす.

$$\|r_{k+1}^y\|_2^2 \approx \|r_k^y\|_2^2 - \frac{(r_k^y, Sr_k^y)^2}{(Sr_k^y, Sr_k^y)}. \quad (2.12)$$

これは, パラメータを固定した場合に比べると (2.11) を解くだけの計算コストを必要としてしまう. 従って, 線形システムを十分厳密に解くことを許容する上で (2.11) の代わりに次の線形システム解くことにして計算コストの短縮について考える.

$$\frac{1}{\omega} Aw = B^T r_k^y. \quad (2.13)$$

但し, ω はパラメータであり Cr_k^y の代わりに ωCr_k^y を加える. そして, $\mathbf{r}_k$ と α_k に対応するものをそれぞれ $\mathbf{r}_k^\omega$ と α_k^ω で表わす時,

$$\mathbf{r}_k^\omega \approx \omega Sr_k^y, \quad \alpha_k^\omega = \frac{(r_k^y, \mathbf{r}_k^\omega)}{(\mathbf{r}_k^\omega, \mathbf{r}_k^\omega)} \approx \frac{1}{\omega} \frac{(r_k^y, Sr_k^y)}{(Sr_k^y, Sr_k^y)}$$

である. よって, (2.12) は次のようになる.

$$\|r_{k+1}^y\|_2^2 \approx \|r_k^y\|_2^2 - \frac{2\omega - 1}{\omega^2} \frac{(r_k^y, Sr_k^y)^2}{(Sr_k^y, Sr_k^y)}. \quad (2.14)$$

ゆえに, $\omega > \frac{1}{2}$ 同様に $0 < \hat{\omega} := \frac{2\omega - 1}{\omega^2} \leq 1$ とすれば単調減少することが分かる.

ここでの目的は Orthomin(1) 法 ($\omega = 1$) より速い収束をするような ω を見つけることである. しかし, 実際にどのような ω が有効であるかは不明である. そこで, (2.14) の減少量に注目して k から $k+2$ ステップの減少量の増加を目的とした平均的な意味での ω の推定を行う為に次について考える. また, (2.12) と (2.14) は内反復法では等式となることに注意する.

ここで, inexact の場合のアルゴリズムは次のようになる.

アルゴリズム 2.4 (The inexact Uzawa Algorithm with parameter-Orthomin(1) Method)

Given an initial guess y_0
 For $k = 0$ until convergence
 Compute x_{k+1} such that $Ax_{k+1} = f - B^T y_k + r_k^x$
 Compute $r_k^y = (Bx_{k+1} - Cy_k - g)$
 Compute w_k such that $Aw_k = B^T r_k^y + \delta_k$
 Compute $r_k = Bw_k - Cr_k^y$
 Compute $y_{k+1} = y_k + \alpha_k^\omega r_k^y$ where $\alpha_k^\omega = \frac{(r_k^y, r_k)}{(r_k, r_k)} / \omega$ ω : parameter

ω を用いた Orthomin(1) 法において (2.10) と (2.14) より,

$$\begin{aligned} \|r_{k+2}^y\|_2^2 &\approx \|r_{k+1}^y\|_2^2 - \hat{\omega} \frac{(r_{k+1}^y, Sr_{k+1}^y)^2}{(Sr_{k+1}^y, Sr_{k+1}^y)} \\ &= \|r_k^y\|_2^2 - \hat{\omega} \left\{ \frac{(r_k^y, Sr_k^y)^2}{(Sr_k^y, Sr_k^y)} + \frac{(r_{k+1}^y, Sr_{k+1}^y)^2}{(Sr_{k+1}^y, Sr_{k+1}^y)} \right\} \end{aligned}$$

であることから, 次を考える.

$$\Lambda(S) := \frac{(r_k^y, Sr_k^y)^2}{(Sr_k^y, Sr_k^y)} + \frac{(r_{k+1}^y, Sr_{k+1}^y)^2}{(Sr_{k+1}^y, Sr_{k+1}^y)}$$

とすると, $\Lambda(S)$ は次を満たす.

$$\begin{aligned} \Lambda(S) &= \alpha_k(r_k^y, Sr_k^y) + \frac{(r_{k+1}^y, Sr_{k+1}^y)^2}{(Sr_{k+1}^y, Sr_{k+1}^y)} \\ &= \alpha_k(r_k^y, Sr_k^y) + \frac{[(\omega^2 - 2\omega)(r_k^y, Sr_k^y) + \alpha_k^2(Sr_k^y, S^2r_k^y)]^2}{\omega^2(Sr_k^y, Sr_k^y) - 2\omega\alpha_k(Sr_k^y, S^2r_k^y) + \alpha_k^2(S^2r_k^y, S^2r_k^y)} \\ &= \frac{\Theta(S, \omega)}{([\alpha_k S - \omega I]^2 S^2 r_k^y, r_k^y)}. \end{aligned} \tag{2.15}$$

但し, $\Theta(S, \omega) := ([\alpha_k^3 S^4 + \alpha_k^2(2\omega(\omega - 3) + \alpha_k \beta_k) S^3 + \omega^2(\omega^2 - 4\omega + 5) S] r_k^y, r_k^y)$ であり,

$$\alpha_k = \frac{(r_k^y, Sr_k^y)}{(Sr_k^y, Sr_k^y)}, \quad \beta_k = \frac{(Sr_k^y, S^2r_k^y)}{(Sr_k^y, Sr_k^y)}$$

である. また, S の固有値を λ として最大と最小の固有値をそれぞれ $\lambda_{\max}$ と $\lambda_{\min}$ とする. ここで,

$$\lambda_{\min}^a(y, y) \leq (S^a y, y) \leq \lambda_{\max}^a(y, y), \quad \forall y \in \mathfrak{R}^m, \quad a \in N$$

であることから, $(S^a y, y)$ を次により平均値として近似する.

$$(S^a y, y) \sim \frac{(y, y)}{\lambda_{\max} - \lambda_{\min}} \int_{\lambda_{\min}}^{\lambda_{\max}} \lambda^a d\lambda. \tag{2.16}$$

この時, (2.16) より α_k と β_k は次を満足する.

$$\alpha_k = \frac{(r_k^y, Sr_k^y)}{(Sr_k^y, Sr_k^y)} \sim \frac{3}{2} \frac{\lambda_{\max}^2 - \lambda_{\min}^2}{\lambda_{\max}^3 - \lambda_{\min}^3}, \quad \beta_k = \frac{(Sr_k^y, S^2 r_k^y)}{(Sr_k^y, Sr_k^y)} \sim \frac{3}{4} \frac{\lambda_{\max}^4 - \lambda_{\min}^4}{\lambda_{\max}^3 - \lambda_{\min}^3}. \quad (2.17)$$

また, $\text{cond}(S) = \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}}$ を S の条件数とし ($\lambda_{\max}, \lambda_{\min} > 0$),

$$K = \text{cond}(S) + \frac{1}{\text{cond}(S)} \geq 1$$

とする. そして, 後の計算の為に次を示しておく.

$$\begin{aligned} \frac{\lambda_{\max}^2}{\lambda_{\min}^2} + \frac{\lambda_{\min}^2}{\lambda_{\max}^2} &= \left(\frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}} + \frac{\lambda_{\min}}{\lambda_{\max}} \right)^2 - 2 = K^2 - 2, \\ \frac{\lambda_{\max}^3}{\lambda_{\min}^3} + \frac{\lambda_{\min}^3}{\lambda_{\max}^3} &= \left(\frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}} + \frac{\lambda_{\min}}{\lambda_{\max}} \right)^3 - 3 \left(\frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}} + \frac{\lambda_{\min}}{\lambda_{\max}} \right) = K^3 - 3K, \\ \frac{\lambda_{\max}^4}{\lambda_{\min}^4} + \frac{\lambda_{\min}^4}{\lambda_{\max}^4} &= \left(\frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}} + \frac{\lambda_{\min}}{\lambda_{\max}} \right)^4 - 4 \left(\frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}} + \frac{\lambda_{\min}}{\lambda_{\max}} \right) = K^4 - 4K^2 + 2. \end{aligned} \quad (2.18)$$

ここで, $\omega = 1$ (Orthomin(1) 法) と任意の ω において (2.15) の分母は次を満たす.

$$([\alpha_k S - I]^2 S^2 r_k^y, r_k^y) - ([\alpha_k S - \omega I]^2 S^2 r_k^y, r_k^y) = (\omega - 1) \{ (2\alpha_k S^3 r_k^y, r_k^y) - (\omega + 1)(S^2 r_k^y, r_k^y) \}.$$

よって, (2.16)-(2.17) により次を得る. 但し, ここでの本質は値の正負であるので $(r_k^y, r_k^y) = 1$ とする.

$$\begin{aligned} (2\alpha_k S^3 r_k^y, r_k^y) &\sim 2 \frac{3}{2} \frac{\lambda_{\max}^2 - \lambda_{\min}^2}{\lambda_{\max}^3 - \lambda_{\min}^3} \frac{1}{4} \frac{\lambda_{\max}^4 - \lambda_{\min}^4}{\lambda_{\max} - \lambda_{\min}} = \frac{9(\lambda_{\max}^2 + 2\lambda_{\max}\lambda_{\min} + \lambda_{\min}^2)(\lambda_{\max}^2 + \lambda_{\min}^2)}{12(\lambda_{\max}^2 + \lambda_{\max}\lambda_{\min} + \lambda_{\min}^2)}, \\ (S^2 r_k^y, r_k^y) &\sim \frac{1}{3} \frac{\lambda_{\max}^3 - \lambda_{\min}^3}{\lambda_{\max} - \lambda_{\min}} = \frac{4(\lambda_{\max}^2 + \lambda_{\max}\lambda_{\min} + \lambda_{\min}^2)^2}{12(\lambda_{\max}^2 + \lambda_{\max}\lambda_{\min} + \lambda_{\min}^2)}. \end{aligned}$$

ゆえに, (2.18) より次を導く.

$$\begin{aligned} (2\alpha_k S^3 r_k^y, r_k^y) - (\omega + 1)(S^2 r_k^y, r_k^y) &\sim \lambda_{\max}\lambda_{\min} \frac{9K(K+2) - 4(\omega+1)(K+1)^2}{12(K+1)} \\ &= \lambda_{\max}\lambda_{\min} \frac{(5-4\omega)(K^2+2K) - 4(\omega+1)}{12(K+1)} \\ &=: \Phi(\omega, K). \end{aligned}$$

従って, $\omega - 1$ を掛けることに注意して $\Phi(\omega, K) \geq 0$ となるのは次のような場合である.

$$\begin{aligned} \text{if } K \geq 5 &\Rightarrow 1 \leq \omega \leq 1.1874 < 171/144. \\ \text{if } K \geq 10 &\Rightarrow 1 \leq \omega \leq 1.2314 < 596/484. \\ \text{if } K \geq 100 &\Rightarrow 1 \leq \omega \leq 1.2497 < 50996/40804. \end{aligned} \quad (2.19)$$

よって, この範囲では $\omega = 1$ (Orthomin(1) 法) と任意の ω において (2.15) の分子について考えれば十分である. すなわち, $\Psi(S, \omega) := \hat{\omega} \Theta(S, \omega) - \Theta(S, 1)$ とする時には次を満たす.

$$\Psi(S, \omega) = (\hat{\omega} - 1) \alpha_k^3 ([S^4 + \beta_k S^3] r_k^y, r_k^y) + (\omega - 1) \left(\left[\frac{2(2\omega - 3)}{\omega} \alpha_k^2 S^3 + (2\omega^2 - 7\omega + 7) S \right] r_k^y, r_k^y \right).$$

混乱を防ぐ為に, $\Psi(S, \omega)$ の 1 項目と 2 項目を別々に考えることにする.

$$\begin{aligned} \Psi_1(S, \omega) &= \alpha_k^3 ([S^4 + \beta_k S^3] r_k^y, r_k^y), \\ \Psi_2(S, \omega) &= \left(\left[\frac{2(2\omega - 3)}{\omega} \alpha_k^2 S^3 + (2\omega^2 - 7\omega + 7) S \right] r_k^y, r_k^y \right). \end{aligned}$$

初めに, $\Psi_1(S, \omega)$ は (2.16)-(2.17) より次を満たす.

$$\begin{aligned}
\frac{\Psi_1(S, \omega)}{(\lambda_{\max}^2 - \lambda_{\min}^2)^2} &\sim \frac{3^3}{2^3} \frac{\lambda_{\max}^2 - \lambda_{\min}^2}{(\lambda_{\max}^3 - \lambda_{\min}^3)^3} \left\{ \frac{1}{5} \frac{\lambda_{\max}^5 - \lambda_{\min}^5}{\lambda_{\max} - \lambda_{\min}} + \frac{3}{4} \frac{\lambda_{\max}^4 - \lambda_{\min}^4}{\lambda_{\max}^3 - \lambda_{\min}^3} \frac{1}{4} \frac{(\lambda_{\max}^4 - \lambda_{\min}^4)}{\lambda_{\max} - \lambda_{\min}} \right\} \\
&= \frac{27}{640} \frac{\lambda_{\max} + \lambda_{\min}}{(\lambda_{\max}^3 - \lambda_{\min}^3)^4} \{ 16(\lambda_{\max}^5 - \lambda_{\min}^5)(\lambda_{\max}^3 - \lambda_{\min}^3) + 15(\lambda_{\max}^4 - \lambda_{\min}^4)^2 \} \\
&= \frac{27}{640} \frac{\lambda_{\max} + \lambda_{\min}}{(\lambda_{\max}^3 - \lambda_{\min}^3)^4} (31\lambda_{\max}^8 - 16\lambda_{\max}^5\lambda_{\min}^3 - 30\lambda_{\max}^4\lambda_{\min}^4 - 16\lambda_{\max}^3\lambda_{\min}^5 + 31\lambda_{\min}^8).
\end{aligned}$$

ゆえに, (2.18) より次を導く.

$$\begin{aligned}
\Psi_1(S, \omega) &\sim \frac{27}{640} \frac{\lambda_{\max} + \lambda_{\min}}{(K^3 - 3K - 2)^2} \{ 31(K^4 - 4K^2 + 2) - 16K - 30 \} (K^2 - 4) \\
&= \frac{27}{640} \frac{\lambda_{\max} + \lambda_{\min}}{(K^3 - 3K - 2)^2} (31K^6 - 248K^4 - 16K^3 + 528K^2 + 64K - 128). \quad (2.20)
\end{aligned}$$

次に, $\Psi_2(S, \omega)$ は (2.16)-(2.17) より次を満たす.

$$\begin{aligned}
\Psi_2(S, \omega) &\sim \left\{ \frac{2(2\omega - 3)}{\omega} \frac{3^2}{2^2} \frac{(\lambda_{\max}^2 - \lambda_{\min}^2)^2}{(\lambda_{\max}^3 - \lambda_{\min}^3)^2} \frac{1}{4} \frac{\lambda_{\max}^4 - \lambda_{\min}^4}{\lambda_{\max} - \lambda_{\min}} + (2\omega^2 - 7\omega + 7) \frac{1}{2} \frac{\lambda_{\max}^2 - \lambda_{\min}^2}{\lambda_{\max} - \lambda_{\min}} \right\} \\
&= \frac{\lambda_{\max} + \lambda_{\min}}{8\omega} \left\{ 9(2\omega - 3) \frac{(\lambda_{\max}^2 - \lambda_{\min}^2)^2 (\lambda_{\max}^2 + \lambda_{\min}^2)}{(\lambda_{\max}^3 - \lambda_{\min}^3)^2} + 4\omega(2\omega^2 - 7\omega + 7) \right\}.
\end{aligned}$$

従って, (2.18) より次を導く.

$$\begin{aligned}
\Psi_2(S, \omega) &\sim \frac{\lambda_{\max} + \lambda_{\min}}{8\omega} \left\{ 9(2\omega - 3) \frac{K(K^2 - 4)}{K^3 - 3K - 2} + 4\omega(2\omega^2 - 7\omega + 7) \right\} \\
&= \frac{\lambda_{\max} + \lambda_{\min}}{8\omega} \left\{ 9(2\omega - 3) \frac{K^3 - 4K}{K^3 - 3K - 2} + 4\omega(2\omega^2 - 7\omega + 7) \right\}. \quad (2.21)
\end{aligned}$$

よって,

$$\begin{aligned}
\Psi(S, \omega) &= (\hat{\omega} - 1)\Psi_1(S, \omega) + (\omega - 1)\Psi_2(S, \omega) \\
&= (\omega - 1) \left\{ \frac{1 - \omega}{\omega^2} \Psi_1(S, \omega) + \Psi_2(S, \omega) \right\}
\end{aligned}$$

であるので (2.20)-(2.21) により, $\mathbf{c} = \frac{\omega - 1}{640\omega^2} \frac{\lambda_{\max} + \lambda_{\min}}{(K^3 - 3K - 2)^2} \geq 0$, ($\omega \geq 1$, $\lambda_{\max} \neq \lambda_{\min}$) とすると $\Psi(S, \omega)$ は次を満足する.

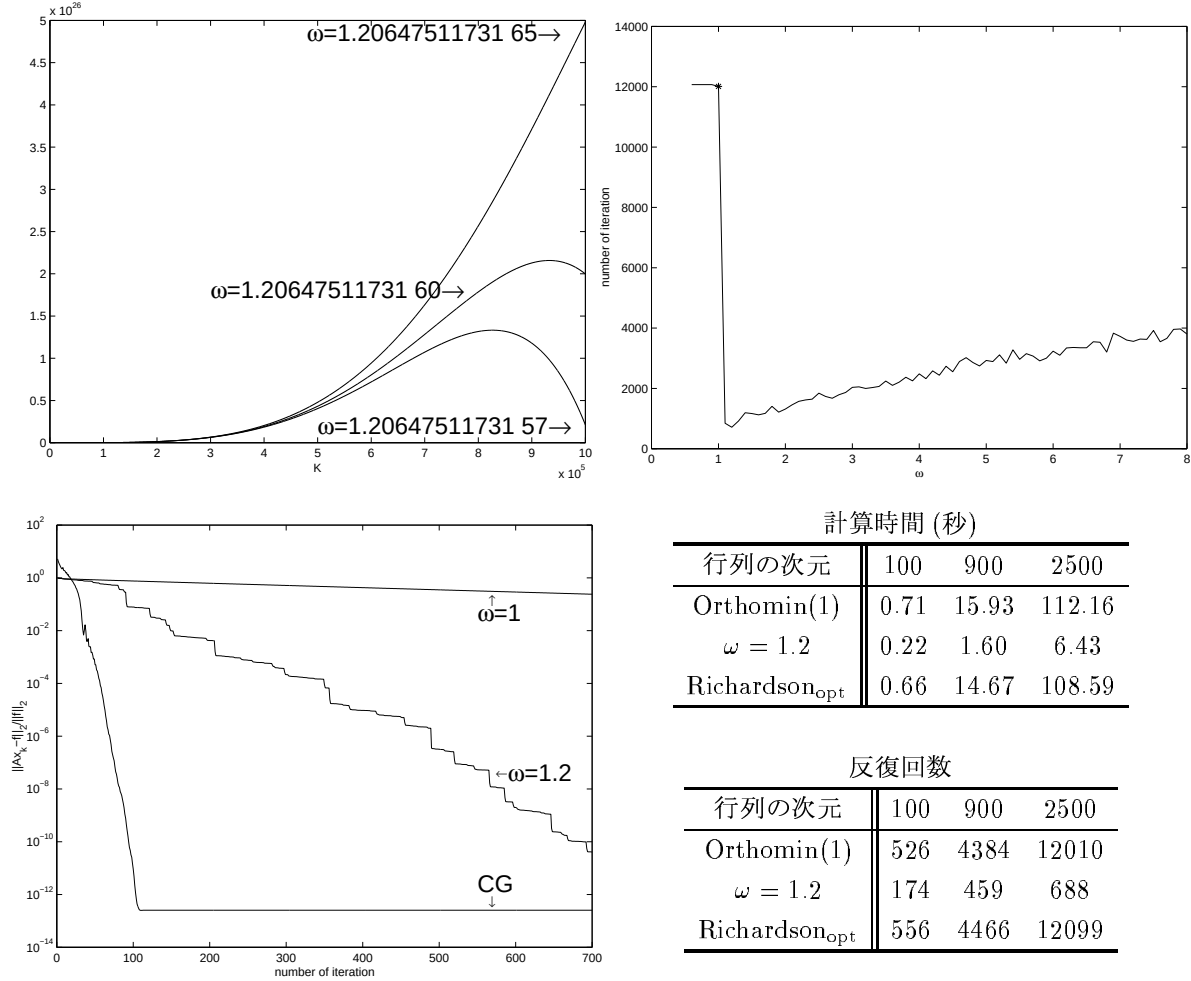
$$\begin{aligned}
\Psi(S, \omega) &\sim 27\mathbf{c}(1 - \omega)(31K^6 - 248K^4 - 16K^3 + 528K^2 + 64K - 128) \\
&\quad + 80\mathbf{c}(K^3 - 3K - 2) \{ 9\omega(2\omega - 3)(K^3 - 4K) + 4\omega^2(2\omega^2 - 7\omega + 7)(K^3 - 3K - 2) \} \\
&= \mathbf{c}(1 - \omega)(837K^6 - 6696K^4 - 432K^3 + 14256K^2 + 1728K - 3456) \\
&\quad + \mathbf{c}(2\omega^2 - 3\omega)(720K^6 - 5040K^4 - 1440K^3 + 8640K^2 + 5760K) \\
&\quad + \mathbf{c}(2\omega^4 - 7\omega^3 + 7\omega^2)(320K^6 - 1920K^4 - 1280K^3 + 2880K^2 + 3840K + 1280).
\end{aligned}$$

ゆえに, これを整理すると次のようになる.

$$\begin{aligned}
\Psi(S, \omega) &\sim \mathbf{c}(640\omega^4 - 2240\omega^3 + 3680\omega^2 - 2997\omega + 837)K^6 \\
&\quad - \mathbf{c}(3840\omega^4 - 13440\omega^3 + 23520\omega^2 - 21816\omega + 6696)K^4 \\
&\quad - \mathbf{c}(2560\omega^4 - 8960\omega^3 + 11840\omega^2 - 4752\omega + 432)K^3 \\
&\quad + \mathbf{c}(5760\omega^4 - 20160\omega^3 + 37440\omega^2 - 40176\omega + 14256)K^2 \\
&\quad + \mathbf{c}(7680\omega^4 - 26880\omega^3 + 38400\omega^2 - 19008\omega + 1728)K \\
&\quad + \mathbf{c}(2560\omega^4 - 8960\omega^3 + 8960\omega^2 + 3456\omega - 3456). \quad (2.22)
\end{aligned}$$

つまり、(2.19) と (2.22) が共に正となる ω を見つける訳である。これを満たす ω は k から $k+2$ ステップにおいて Orthomin(1) 法よりも速い収束をするものである。もちろん、これは平均的に考えているので多少の不安を残している。従って、初めに内反復の場合の例を用いて数値実験を行うことにする。

図 1:



例 2.1 次の斉次ディリクレ問題について考える。

$$\begin{aligned} -\Delta u &= -2(x^2 + y^2 - x - y) \quad \text{in } \Omega = (0, 1) \times (0, 1) \\ u &= 0 \quad \text{on } \Gamma = \partial\Omega \end{aligned}$$

図 1 左上は、 $1 \leq K \leq 10^6$ の範囲で 3 つの ω の値を用いて (2.22) をプロットさせたものである。また、右上は例 2.1 を直角三角形分割での区分 1 次多項式を基底関数とする有限要素法により $Ax = \hat{f}$ と離散化して、 ω を用いた Orthomin(1) 法を打ち切り基準 $\|Ax_k - \hat{f}\|_2 / \|\hat{f}\|_2 < 10^{-10}$ で計算を実行した場合の反復回数 (縦軸) と ω の値 (横軸) との関係性をプロットさせたものであり、左下は $\omega = 1$ (Orthomin(1) 法) と $\omega = 1.2$ における $\|Ax_k - \hat{f}\|_2 / \|\hat{f}\|_2$ の軌道をプロットさせたものである。比較として、CG 法の軌道もプロットしてある。図 1 右上、左下で使用した行列の次元は 2500 である。

(2.19) と図 1 より $\omega \approx 1.2$ 付近が有効な値と推測される。従って、この大幅な反復回数の短縮がどの程度外反復に適用されるか後の数値例で比較する。

3 鞍点型問題の精度保証

次の方法は、線形方程式の精度保証においてよく知られた方法である。これらの詳細については、方法 3.1 は Siegfried M. Rump による [12]，方法 3.2 は大石進一による [14] そして方法 3.3 は中尾充宏と山本野人による [16] を参照とする。特に [16] は、無限次元の精度保証について詳しく示している。

鞍点型問題 (1.1) において、 $z^* = (x^*, y^*)^T$ と $\tilde{z} = (\tilde{x}, \tilde{y})^T$ をそれぞれ一意解と近似解とし、 $b = (f, g)^T$ ならびに $\text{rank}(B) = m$ を再び記しておく。そして、 LU と R をそれぞれ (1.1) の係数行列 H の近似 LU -分解と近似逆行列とする。すなわち $H \approx LU$ 、 $H^{-1} \approx R$ である。

方法 3.1 [12].

$$\|z^* - \tilde{z}\|_\infty \leq \frac{\sqrt{n+m} \|H\tilde{z} - b\|_\infty}{\sigma_{\min}(LU) - \sqrt{n+m} \|LU - H\|_\infty}.$$

方法 3.2 [14].

$$\|z^* - \tilde{z}\|_\infty \leq \frac{\|U^{-1}L^{-1}(H\tilde{z} - b)\|_\infty}{1 - \|(U^{-1}L^{-1})H - I\|_\infty}.$$

方法 3.3 [16].

$$\begin{aligned} K(Z) &:= \tilde{z} - R(H\tilde{z} - b) + (I - RH)(Z - \tilde{z}) \subset \mathbb{R}^{n+m}, \\ K(Z) &\subset \text{int}(Z) \Rightarrow z^* \in K(Z). \end{aligned}$$

ここに、 $\sigma_{\min}$ は LU の最小の特異値、 Z は $(n+m)$ 次元区間ベクトルである。

上の 3 つの方法はすべて全体系のままで考えているが、(1.1) の係数行列は部分的にはとても良い性質を持った行列である。ここでは、このことを利用した次の定理を証明する。

定理 3.1 (x^*, y^*) と $(\tilde{x}, \tilde{y})$ をそれぞれ鞍点型問題 (1.1) の一意解と近似解とする。そして、

$$\begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & B^T \\ B & -C \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{x} \\ \tilde{y} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix}$$

を残差ベクトルとする。この時、 $(\tilde{x}, \tilde{y})$ は次を満たす。

$$\|x^* - \tilde{x}\|_2 \leq \|A^{-1}\|_2 (\|r_1\|_2 + \|B^T\|_2 \|y^* - \tilde{y}\|_2), \quad (3.1)$$

$$\|y^* - \tilde{y}\|_2 \leq \|A\|_2 \|(BB^T)^{-1}\|_2 (\|r_2\|_2 + \|BA^{-1}\|_2 \|r_1\|_2). \quad (3.2)$$

証明： 最初に、 $r_1^* = A\tilde{x} + B^T y^* - f$ とする。この時、

$$A\tilde{x} + B^T \tilde{y} - f = r_1, \quad Ax^* + B^T y^* - f = 0$$

であるので次を得る。

$$\begin{aligned} A(\tilde{x} - x^*) &= r_1 + B^T(y^* - \tilde{y}) \\ &= A\tilde{x} + B^T \tilde{y} - f + B^T(y^* - \tilde{y}) \\ &= A\tilde{x} + B^T y^* - f \\ &= r_1^*. \end{aligned} \quad (3.3)$$

よって、次式により (3.1) を導く。

$$\begin{aligned} \|x^* - \tilde{x}\|_2 &\leq \|A^{-1}\|_2 \|r_1^*\|_2 \\ &\leq \|A^{-1}\|_2 (\|r_1\|_2 + \|B^T\|_2 \|y^* - \tilde{y}\|_2). \end{aligned}$$

また, $S = BA^{-1}B^T + C$, $r_2^* = S\tilde{y} - BA^{-1}f + g$ とする. この時, (1.1) より次を得る.

$$Sy^* = (BA^{-1}B^T + C)y^* = BA^{-1}f - g = S\tilde{y} - r_2^*.$$

ゆえに, $\tilde{y} - y^* = S^{-1}r_2^*$ となり次を導く.

$$\|y^* - \tilde{y}\|_2 \leq \|S^{-1}\|_2 \|r_2^*\|_2.$$

従って, $\|S^{-1}\|_2$ と $\|r_2^*\|_2$ の評価を必要とする.

初めに, $\|S^{-1}\|_2$ について考える.

仮定から C は半正定値対称行列であり, A と BB^T は正定値対称行列であるので次を得る.

$$\begin{aligned} \|S^{-1}\|_2 &\leq \|(BA^{-1}B^T)^{-1}\|_2 \\ &= \max_{\substack{y \in \mathbb{R}^m \\ \|y\|_2=1}} ((BA^{-1}B^T)^{-1}y, y) \\ &= \frac{1}{\min_{\substack{y \in \mathbb{R}^m \\ \|y\|_2=1}} (BA^{-1}B^T y, y)}. \end{aligned}$$

ここで, 次を定義する.

$$X := \{B^T y \mid y \in \mathbb{R}^m, \|y\|_2 = 1\}.$$

この時, $n \geq m$ であることから次を導く.

$$\begin{aligned} \min_{\substack{y \in \mathbb{R}^m \\ \|y\|_2=1}} (BA^{-1}B^T y, y) &= \min_{x \in X} (A^{-1}x, x) \\ &\geq \min_{x \in X} \frac{(A^{-1}x, x)}{(x, x)} \min_{x \in X} (x, x) \\ &\geq \min_{x \in \mathbb{R}^n} \frac{(A^{-1}x, x)}{(x, x)} \min_{x \in X} (x, x) \\ &= \frac{1}{\lambda_{\max}(A)} \min_{x \in X} (x, x) \\ &= \frac{1}{\lambda_{\max}(A)} \min_{\substack{y \in \mathbb{R}^m \\ \|y\|_2=1}} (B^T y, B^T y) \\ &= \frac{\lambda_{\min}(BB^T)}{\lambda_{\max}(A)}. \end{aligned}$$

よって, 次の評価を得る.

$$\|S^{-1}\|_2 \leq \frac{1}{\min_{\substack{y \in \mathbb{R}^m \\ \|y\|_2=1}} (BA^{-1}B^T y, y)} \leq \frac{\lambda_{\max}(A)}{\lambda_{\min}(BB^T)} = \|A\|_2 \|(BB^T)^{-1}\|_2. \quad (3.4)$$

最後に, $\|r_2^*\|_2$ について考える.

$$r_2^* = S\tilde{y} - BA^{-1}f + g, \quad r_2 = B\tilde{x} - C\tilde{y} - g$$

であることから次を導く.

$$\begin{aligned} r_2 &= BA^{-1}(f - B^T \tilde{y} + r_1) - C\tilde{y} - g \\ &= BA^{-1}r_1 + BA^{-1}f - g - S\tilde{y} \\ &= BA^{-1}r_1 - r_2^* \end{aligned}$$

ゆえに、次の評価を得る.

$$\begin{aligned}
\|r_2^*\|_2 &= \|r_2 - BA^{-1}r_1\|_2 \\
&\leq \|r_2\|_2 + \|BA^{-1}r_1\|_2 \\
&\leq \|r_2\|_2 + \|BA^{-1}\|_2 \|r_1\|_2.
\end{aligned} \tag{3.5}$$

従って、(3.4) と (3.5) を組み合わせると (3.2) を導く. ♠♥♠

この定理は、例えば (3.3) から (3.1) の代わりに次のような評価を行うこともできる.

$$\|x^* - \tilde{x}\|_\infty \leq \|A^{-1}\|_\infty (\|r_1\|_\infty + \|B^T\|_\infty \|y^* - \tilde{y}\|_\infty).$$

また、 A と $B^T B$ の対称性より次の性質が知られている.

$$\|A\|_2 = \rho(A) \leq \|A\|_\infty, \quad \|B\|_2 = \sqrt{\rho(B^T B)} \leq \sqrt{\|B^T B\|_\infty}.$$

よって、実用的な形の 1 つとして次の結果を与える.

系 3.1 定理 3.1 の仮定のもとで、 $(\tilde{x}, \tilde{y})$ は次を満たす.

$$\begin{aligned}
\|x^* - \tilde{x}\|_\infty &\leq \|A^{-1}\|_\infty (\|r_1\|_\infty + \|B^T\|_\infty \|y^* - \tilde{y}\|_\infty), \\
\|y^* - \tilde{y}\|_2 &\leq \|A\|_\infty \|(BB^T)^{-1}\|_\infty \left(\|r_2\|_2 + \sqrt{\|B^T B\|_\infty} \|A^{-1}\|_\infty \|r_1\|_2 \right).
\end{aligned}$$

次の補題は Ogita, Oishi および Ushiro によるモノトーン行列の高速精度保証の結果である [10]. 但し、 A がモノトーン行列とは A^{-1} のすべての成分が非負である行列であり、 $A^{-1} \geq O$ と表す. また、 e_k をすべての成分が 1 である k 次ベクトルとして表す.

補題 3.1 [10]. A をモノトーン行列とする. そして、 $\tilde{w}$ を $Aw = e_n$ の近似解とし、 $s = A\tilde{w} - e_n$ を残差ベクトルとする. その時、もし $\|s\|_\infty < 1$ ならば次を満たす.

$$\|A^{-1}\|_\infty \leq \frac{\|\tilde{w}\|_\infty}{1 - \|s\|_\infty}.$$

A がモノトーン行列の場合、系 3.1 と補題 3.1 を用いることにより次の系を導く.

系 3.2 定理 3.1 と補題 3.1 の仮定のもとで、 $(\tilde{x}, \tilde{y})$ は次を満たす.

$$\begin{aligned}
\|x^* - \tilde{x}\|_\infty &\leq \frac{\|\tilde{w}\|_\infty (\|r_1\|_\infty + \|B^T\|_\infty \|y^* - \tilde{y}\|_\infty)}{1 - \|s\|_\infty}, \\
\|y^* - \tilde{y}\|_2 &\leq \|A\|_\infty \|(BB^T)^{-1}\|_\infty \left(\|r_2\|_2 + \frac{\sqrt{\|B^T B\|_\infty} \|\tilde{w}\|_\infty \|r_1\|_2}{1 - \|s\|_\infty} \right).
\end{aligned}$$

もちろん A^{-1} や $(BB^T)^{-1}$ の評価は必要であるが、定理 3.1 は不定値問題である (1.1) の精度保証を評価する行列を分離することにより、正定値問題の精度保証に置き換える結果である. これは、例えば方法 3.2 の計算手法を用いる場合では不定値問題は LU -分解とその異なる 2 つの近似逆行列が必要となることに対して、系 3.1-3.2 はコレスキー分解と 1 つの近似逆行列を求めるだけでよく、計算コストやメモリーの節約という面においてかなりの高速化が期待できるものである. また、行列 C を評価対象にしていないことにも注意する.

L を $m \times m$ 正則行列とする。この時、(1.1) は次と同値である。

$$\begin{pmatrix} I & O \\ O & L^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B^T \\ B & -C \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f \\ L^{-1}g \end{pmatrix}.$$

これは、次のようにも書ける。

$$\begin{pmatrix} A & (L^{-1}B)^T \\ L^{-1}B & -L^{-1}CL^{-T} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ L^T y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f \\ L^{-1}g \end{pmatrix}.$$

よって、最後に前処理を適用した次の結果を与える。

定理 3.2 (x^*, y^*) と $(\tilde{x}, \tilde{y})$ をそれぞれ (1.1) の一意解と近似解とする。そして、 L を $m \times m$ 正則行列とし、

$$\begin{pmatrix} r_1 \\ \hat{r}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & (L^{-1}B)^T \\ L^{-1}B & -L^{-1}CL^{-T} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{x} \\ L^T \tilde{y} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} f \\ L^{-1}g \end{pmatrix}$$

を残差ベクトルとする。この時、 $(\tilde{x}, \tilde{y})$ は次を満たす。

$$\|x^* - \tilde{x}\|_2 \leq \|A^{-1}\|_2 (\|r_1\|_2 + \|(L^{-1}B)^T\|_2 \|L^T(y^* - \tilde{y})\|_2), \quad (3.6)$$

$$\|y^* - \tilde{y}\|_2 \leq \|L^{-T}\|_2 \|L^T(y^* - \tilde{y})\|_2. \quad (3.7)$$

但し、 $\|L^T(y^* - \tilde{y})\|_2$ は次により評価される。

$$\|L^T(y^* - \tilde{y})\|_2 \leq \|A\|_2 \|L^T(BB^T)^{-1}L\|_2 (\|\hat{r}_2\|_2 + \|(L^{-1}B)A^{-1}\|_2 \|r_1\|_2). \quad (3.8)$$

証明： (3.6) と (3.8) は定理 3.1 より明らかである。ゆえに、(3.7) を証明する。

ノルムの不等式により、

$$\|y^* - \tilde{y}\|_2 = \|L^{-T}L^T(y^* - \tilde{y})\|_2 \leq \|L^{-T}\|_2 \|L^T(y^* - \tilde{y})\|_2.$$

となり (3.7) は証明される。また、別の証明として次のことも同時に言える。

$$\|L^T(y^* - \tilde{y})\|_2^2 = (LL^T(y^* - \tilde{y}), y^* - \tilde{y}) \geq \frac{\|y^* - \tilde{y}\|_2^2}{\rho((LL^T)^{-1})}.$$

従って、

$$\begin{aligned} \|y^* - \tilde{y}\|_2 &\leq \sqrt{\rho((LL^T)^{-1})} \|L^T(y^* - \tilde{y})\|_2 \\ &= \sqrt{\rho(L^{-T}L^{-1})} \|L^T(y^* - \tilde{y})\|_2 \\ &\leq \|L^{-1}\|_2 \|L^T(y^* - \tilde{y})\|_2. \end{aligned}$$

すなわち、場合によってどちらを用いることもできる。



後の為に、ここで多く用いている非対称行列のノルムの関係を再記しておく。

$$\begin{aligned} \|L\|_2^2 &= \rho(L^T L) = \|L^T L\|_2 \leq \|L^T L\|_\infty \leq \|L^T\|_\infty \|L\|_\infty, \\ \|L^T\|_2^2 &= \rho(LL^T) = \|LL^T\|_2 \leq \|LL^T\|_\infty \leq \|L\|_\infty \|L^T\|_\infty. \end{aligned}$$

よって、

$$\|L\|_2 \|L^T\|_2 \leq \|L\|_\infty \|L^T\|_\infty.$$

4 モデル問題

次のストークス方程式について考える.

$$\begin{aligned} -\nu \Delta u + \nabla p &= \varphi \\ -\operatorname{div} u &= 0 & \text{in } \Omega \\ u &= 0 & \text{on } \Gamma = \partial\Omega \\ \int_{\Omega} p &= 0 \end{aligned} \tag{4.1}$$

但し, $\Omega = (0, 1) \times (0, 1)$ であり $u = (u_1, u_2)$, $\varphi = (\varphi_1, \varphi_2)$ ($\varphi_1, \varphi_2 \in L^2(\Omega)$) である.

ここで, $H^1(\Omega)$ を Ω 上のソボレフ空間として 2 つの空間を次により定義する. そして, $(\cdot, \cdot)$ を $L^2(\Omega)$ での内積として表わすことにする.

$$H_0^1(\Omega) := \{v \in H^1(\Omega) : v = 0 \text{ on } \Gamma\}, \quad L_0^2(\Omega) := \{q \in L^2(\Omega) : (q, 1) = 0\}.$$

また, $V_h \subset H_0^1(\Omega) \times H_0^1(\Omega)$, $P_h \subset L_0^2(\Omega)$ をそれぞれ有限次元部分空間として表し $|q|_0 = (q, q)^{1/2}$, $|v|_1 = |\nabla v|_0$ とする.

この時, (4.1) の有限要素法による離散化ストークス方程式は,

$$\begin{aligned} \nu(\nabla u_h, \nabla \phi) - (p_h, \operatorname{div} \phi) &= (\varphi, \phi) \quad \text{for all } \phi \in V_h \\ -(\psi, \operatorname{div} u_h) &= 0 \quad \text{for all } \psi \in P_h \end{aligned} \tag{4.2}$$

となる $(u_h, p_h) \in V_h \times P_h$ を求めよ, となる.

ここで, u_h, p_h をそれぞれ次のように表わす.

$$u_h = \sum_{i=1}^n \alpha_i \phi_i, \quad p_h = \sum_{j=1}^m \beta_j \psi_j.$$

但し, $\{\phi_i\}_{i=1}^n, \{\psi_j\}_{j=1}^m$ はそれぞれ V_h, P_h の基底関数である.

この時, (4.2) は (1.1) のような鞍点型問題となり, 対応する係数行列は $A = (a_{ij})$ が $a_{ij} = (\nabla \phi_i, \nabla \phi_j)$ であり $B = (b_{ij})$ は $b_{ij} = -(\phi_i, \operatorname{div} \psi_j)$ となる. また, ここでは $C = O$ として考えることにする. そして, よく知られていることとして (4.2) が一意解を持つ為の重要な次の条件を示しておく.

条件 4.1 (inf-sup condition)

$$\inf_{\substack{q_h \in P_h \\ q_h \neq 0}} \sup_{\substack{v_h \in V_h \\ v_h \neq 0}} \frac{-(q_h, \operatorname{div} v_h)}{|v_h|_1 |q_h|_0} \geq \Upsilon$$

となるような定数 $\Upsilon > 0$ が存在する.

実際, 条件 4.1 は B が full-row rank : $\operatorname{rank}(B) = m$ となることを意味している. また, A が V_h で強圧的という条件が必要となるが, これは A が正定値となることを意味している. また, この場合の行列 A はモノトーン行列である.

$\operatorname{rank}(B) = m$ について, $\{\psi_j\}_{j=1}^m$ を $L_0^2(\Omega)$ の基底関数としたがこのような基底関数を考えることは困難である. そこで, この場合の p は圧力を意味することから実際にはその勾配が分かればよいので, 例えば境界上の 1 点を固定することにより積分での不定部分进行处理することにする. その他の方法としては, 鞍点型にはならないがラグランジュの未定乗数法 [17] などがある.

(4.2) において, 係数行列 B の成分は $O(h)$ となっている [付録参照]. よって, $h \rightarrow 0$ ならば $\|BB^T\| \rightarrow 0$, $\|(BB^T)^{-1}\| \rightarrow \infty$ となる. これは, 定理 3.1 や系 3.1-3.2 の評価が h をある程度小さくする時には $\|(BB^T)^{-1}\|$ の影響により不安定なものとなることを意味している. ゆえに, この不安定の解決を目的とする定理 3.2 と補題 3.1 を用いた次の結果を与える.

系 4.1 L を $LL^T = BB^T$ を満たす $m \times m$ 正則行列とした定理 3.2 と補題 3.1 の仮定のもとで, $(\tilde{x}, \tilde{y})$ は次を満たす.

$$\|x^* - \tilde{x}\|_2 \leq \frac{\|\tilde{w}\|_\infty (\|r_1\|_2 + \|L^T(y^* - \tilde{y})\|_2)}{1 - \|s\|_\infty}, \quad (4.3)$$

$$\|y^* - \tilde{y}\|_\infty \leq \|L^{-T}\|_\infty \|L^T(y^* - \tilde{y})\|_\infty. \quad (4.4)$$

但し, $\|L^T(y^* - \tilde{y})\|_2$ は次により評価される.

$$\|L^T(y^* - \tilde{y})\|_2 \leq \|A\|_\infty \left(\|\hat{r}_2\|_2 + \frac{\|\tilde{w}\|_\infty \|r_1\|_2}{1 - \|s\|_\infty} \right). \quad (4.5)$$

証明: ノルムの不等式により (4.4) は明らかであり, 定理 3.2 と補題 3.1 から次を得る.

$$\begin{aligned} \|x^* - \tilde{x}\|_2 &\leq \frac{\|\tilde{w}\|_\infty (\|r_1\|_2 + \|(L^{-1}B)^T\|_2 \|L^T(y^* - \tilde{y})\|_2)}{1 - \|s\|_\infty}, \\ \|L^T(y^* - \tilde{y})\|_2 &\leq \|A\|_\infty \|L^T(BB^T)^{-1}L\|_\infty \left(\|\hat{r}_2\|_2 + \frac{\|L^{-1}B\|_2 \|\tilde{w}\|_\infty \|r_1\|_2}{1 - \|s\|_\infty} \right). \end{aligned}$$

そこで, (4.3) と (4.5) の為に次の評価 $\|(L^{-1}B)^T\|_2 = 1$ と $\|L^{-1}B\|_2 \leq 1$ および $\|L^T(BB^T)^{-1}L\|_\infty = 1$ を証明する.

初めに, $L^T(BB^T)^{-1}L$ はこの系の仮定より次を満たす.

$$\begin{aligned} L^T(BB^T)^{-1}L &= L^T(LL^T)^{-1}L \\ &= (L^{-1}L)^T(L^{-1}L) \\ &= I. \end{aligned} \quad (4.6)$$

従って, $\|I\|_2 = \|I\|_\infty$ より $\|L^T(BB^T)^{-1}L\|_2 = \|L^T(BB^T)^{-1}L\|_\infty = 1$ となる. 次に, $\|(L^{-1}B)^T\|_2$ はこの系の仮定と $(L^{-1}B)(L^{-1}B)^T$ の対称性より次を満たす.

$$\begin{aligned} \|(L^{-1}B)^T\|_2^2 &= \rho((L^{-1}B)(L^{-1}B)^T) \\ &= \|L^{-1}(BB^T)L^{-T}\|_2 \\ &= \|L^{-1}(LL^T)L^{-T}\|_2 \\ &= \|(L^{-1}L)(L^TL^{-T})\|_2 \\ &= 1. \end{aligned} \quad (4.7)$$

よって, $\|(L^{-1}B)^T\|_2 = 1$ となる. 最後に, $\|L^{-1}B\|_2$ はこの系の仮定より次を満たす.

$$\begin{aligned} \|L^{-1}B\|_2^2 &= \rho((L^{-1}B)^T(L^{-1}B)) \\ &= \|(L^{-1}B)^T(L^{-1}B)\|_2 \\ &\leq \|(L^{-1}B)^T\|_2 \|L^{-1}B\|_2. \end{aligned} \quad (4.8)$$

ゆえに, $\|L^{-1}B\|_2 \leq \|(L^{-1}B)^T\|_2 = 1$ となる. ♠♥♠

安定性の為に系 4.1 の仮定を満たすような行列 L を前処理行列として推薦する. 特に, 実際の計算の為に次のように考える場合について説明する.

$$\tilde{L}\tilde{L}^T - BB^T = E_1 \ (\approx O), \quad \hat{L}^{-1}\tilde{L} = I + E_2 \ (\approx I). \quad (4.9)$$

ここに, E_1 は $\tilde{L}\tilde{L}^T$ の BB^T に対する誤差であり, E_2 は $\hat{L}^{-1}$ の $\tilde{L}^{-1}$ に対する誤差である.

初めに, $\|(\hat{L}^{-1}B)^T\|_2$ は (4.7) と (4.9) および E_1 の対称性より次を満たす.

$$\begin{aligned}
\|(\hat{L}^{-1}B)^T\|_2^2 &= \|\hat{L}^{-1}(BB^T)\hat{L}^{-T}\|_2 \\
&= \|\hat{L}^{-1}(\tilde{L}\tilde{L}^T - E_1)\hat{L}^{-T}\|_2 \\
&\leq \|(I + E_2)(I + E_2)^T\|_2 + \|\hat{L}^{-1}\|_2\|E_1\|_2\|\hat{L}^{-T}\|_2 \\
&\leq (1 + \|E_2\|_\infty)(1 + \|E_2^T\|_\infty) + \|E_1\|_\infty\|\hat{L}^{-T}\|_\infty\|\hat{L}^{-1}\|_\infty.
\end{aligned}$$

次に, $\|\hat{L}^{-1}B\|_2$ は (4.8) と同様に $\|\hat{L}^{-1}B\|_2 \leq \|(\hat{L}^{-1}B)^T\|_2$ と評価される. また, $\|\hat{L}^T(BB^T)^{-1}\hat{L}\|_\infty$ については (4.6) と (4.9) から $\hat{L}^{-1}(BB^T)\hat{L}^{-T} \approx (\hat{L}^{-1}\tilde{L})(\hat{L}^{-1}\tilde{L})^T$ となるので, 更に $\hat{L}^{-1}\tilde{L}$ の近似逆行列を求めて方法 3.2 の計算手法を適用する. しかし, これは単位行列への計画であるので $\hat{L}^{-1}\tilde{L}$ の逆行列も自身と同じ程度の不確かさを持つ単位行列であり改めて計算する必要は無いであろう. また, 例えば $\|E_2\|_\infty \approx 2^{-52}$ であれば $\|\hat{L}^T(BB^T)^{-1}\hat{L}\|_\infty \leq 1.1$ としても十分評価できる.

もちろん, これらの評価は (4.9) より計算量が多量であると考えられるが $n \geq m$ (ここでのストークス問題では $(n:m) \approx (8:1)$) であることを考えればある程度の期待は持てる.

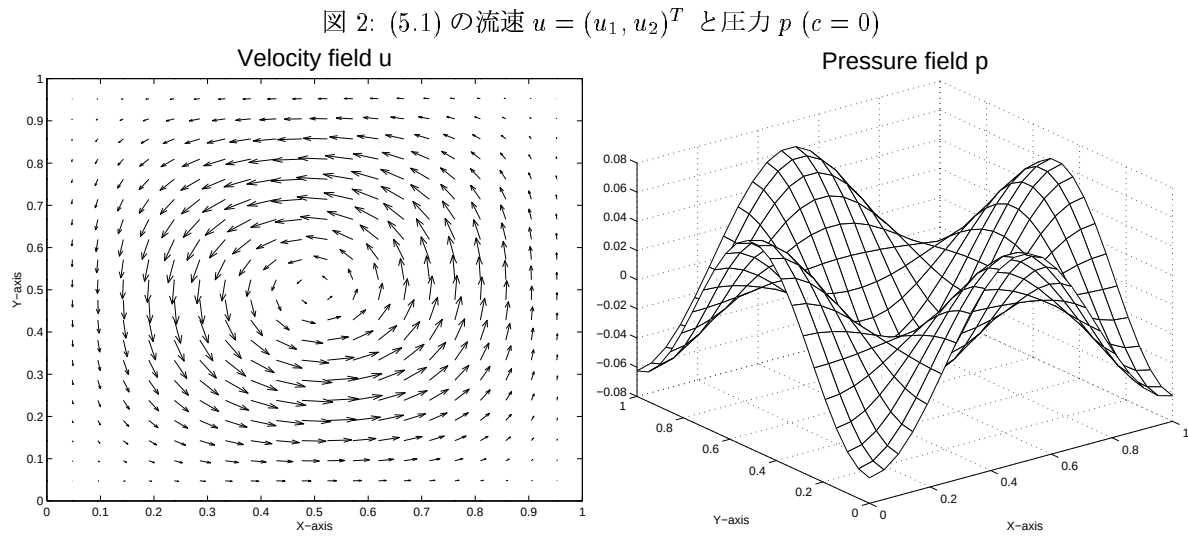
5 数値結果

ここでは, 各区間の幅を h とする分割を用いて数値実験を行った. 但し, 流速においては 2 次基底関数を用いている為に, 実際には $h/2$ の幅での値を求めることになる. すなわち, x, y 軸の分割数をそれぞれ n_x, n_y とし $n_{xy} := n_x = n_y$ ($h = 1/(n_{xy} + 1)$) とする時には, 境界条件を組み込むことにより全体系の行列は $(2(2n_{xy} + 1)^2 + (n_{xy} + 2)^2)$ 次元となる ($n = 2(2n_{xy} + 1)^2$, $m = (n_{xy} + 2)^2$ or $m = (n_{xy} + 2)^2 - 1$). また, 各要素行列の計算は付録に示してある.

ここでは, Y. Watanabe と N. Yamamoto および M. T. Nakao による [13] を参照として,

$$\begin{aligned}
u_1(x, y) &= \sin^2(\pi x) \sin(\pi y) \cos(\pi y), \\
u_2(x, y) &= -\sin^2(\pi y) \sin(\pi x) \cos(\pi x), \\
p(x, y) &= -\cos(2\pi x) \cos(2\pi y)/16 + c
\end{aligned} \tag{5.1}$$

となるような外力項とディリクレ境界条件を与えた ($\nu = 1$). 図 2 は, (5.1) を描いたものである.



以下の数値結果は、MATLAB 5.2 とこの下で動作する INTLAB により得られたものであり、使用した計算機は CPU: Pentium 700MHz の NEC PC(128MB) である。また、計算上メモリー不足となった場合については、'—' と表示してある。

5.1 数値解法

表 1: 計算時間 (単位: 秒)

次元 (n, m)	$\omega=1.0$	$\omega=1.2$	$\omega=2.0$	fixed	LU-ガウス	(LU)	Chol
(882,143)	154.29	16.04	18.35	99.14	0.33	(0.22)	0.00
(3362,483)	121.22	62.12	65.58	76.79	7.91	(7.69)	0.10
(7742,1023)	396.07	197.1	216.35	252.60	32.02	(31.63)	0.27
(13122,1763)	1234.13	467.20	704.53	622.75	148.47	(144.02)	0.72
(20402,2703)	2350.57	879.30	852.39	1052.21	690.79	(645.04)	1.43
(29282,3843)	3886.65	1043.60	1618.44	2439.44	1270.26	(1193.97)	2.58
(39762,5183)	6408.87	1753.37	2229.58	3857.10	—	—	3.57
(51842,6723)	9202.51	3200.65	3517.40	5978.81	—	—	4.72
(65522,8463)	13108.24	4740.03	5254.75	8593.48	—	—	6.92
(80802,10403)	17809.43	7321.84	7541.44	12316.23	—	—	9.17
$\ r_k\ _2/\ f\ _2 < 10^{-6}$					symmmd		

表 2: 反復回数

次元 (n, m)	$\omega=1.0$	$\omega=1.2$	$\omega=2.0$	fixed	LU-ガウス
(882,143)	1611	169	198	2019	1.6045e-14
(3362,483)	143	72	78	214	6.2231e-14
(7742,1023)	136	69	77	221	1.4177e-13
(13122,1763)	172	67	100	204	2.7316e-13
(20402,2703)	178	70	68	193	6.2823e-13
(29282,3843)	180	50	78	218	7.1190e-13
(39762,5183)	184	52	67	221	—
(51842,6723)	184	65	72	227	—
(65522,8463)	187	69	77	236	—
(80802,10403)	186	79	83	234	—
$\ r_k\ _2/\ f\ _2 < 10^{-6}$					symmmd

表 1-2 は $\omega = 1$ と $\omega = 1.2$ そして $\omega = 2$ でのアルゴリズム 2.4 とアルゴリズム 2.2 (fixed) を打ち切り基準 $\|r_k\|_2/\|f\|_2 < 10^{-6}$ で計算を実行した場合の計算時間と反復回数を示したものである ($\tau = 1$)。但し、

$$r_k = \begin{pmatrix} A & B^T \\ B & O \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_k \\ y_k \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} f \\ 0 \end{pmatrix}$$

である。また、表 1 の LU-ガウスは (1.1) の係数行列 H を LU-分解とガウスの消去法を用いて近似解を求めた時の計算時間であり、(LU) はその時の LU-分解に必要とした計算時間である。更に、表 1 の Chol は行列 A をコレスキー分解する為に必要とした計算時間であり、表 2 の LU-ガウスは表 1 の LU-ガウスで求めた近似解の $\|r_k\|_2/\|f\|_2$ の値を示したものである。

ここで、各アルゴリズムにおいて解かなければならない線形システムについてはCG法を用いて計算を行い、特に α_k の計算の(2.13)については残差 δ_k が $\|\delta_k\|_2 < 10^{-14}$ となるように計算を行っている。

表1-2の考察として、線形システム(2.13)を解くだけの計算時間を必要とするが、 $\omega = 1.2$ での反復回数の減少が結果として計算時間の短縮を導いていることが分かる。また、アルゴリズム2.2のパラメータ α の推定方法については省略するが、例2.1の数値実験ではOrthomin(1)法とRichardson法の計算時間や反復回数が類似したものであったことを考慮すると、 $\omega = 1$ の場合と同程度の反復回数が最適な α を用いた場合であると推測される。よって、それを踏まえた計算時間として表2を参照されたい。

```
tic; % Ax = f̂, A ∈ ℝn×n: スパースな正定値対称行列
sy = symmmd(A); As = A(sy, sy);
cA = chol(As);
I = speye(n); P = I(sy, :);
x = P' * (cA \ (cA' \ (P * f̂))); res = norm(A * intval(x) - f̂) / norm(intval(f̂))
toc
```

(5.2)

ここで用いた行列 A は非常にスパースな帯行列である。MATLABではこのような行列に対してsymmmdを利用してコレスキー分解[表1 Chol](不定値ではLU-分解[表1 (LU)])とガウスの消去法との組み合わせにより、高速に線形システムを解くことができる。

表 3: (5.2) を利用した例 2.1 の結果

行列の次元	10000	40000	90000	160000	250000
時間 (秒)	0.77	6.48	29.00	299.68	799.38
Chol (秒)	0.60	5.71	25.16	200.81	461.21
res	3.9343e-13	1.8363e-12	4.3513e-12	8.3506e-12	1.2616e-11
norm(intval(f̂))	0.0069	0.0035	0.0023	0.0017	0.0014

表3は、例2.1を(5.2)で実行した時の全体の計算時間とその中のコレスキー分解の計算時間そして残差の値を示したものである。結果から(5.2)での解法が高速であることが分かる。

表 4: (5.2) を利用した計算時間 (単位: 秒)

次元 (n, m)	$\omega=1.0$	$\omega=1.2$	$\omega=2.0$	fixed	Orthomin(2)	$\omega=1.2$	Orthomin(2)
(882,143)	25.76	2.58	4.18	17.13	4.61	9.83	5.50
(3362,483)	16.20	4.34	4.61	10.77	22.25	79.03	47.45
(7742,1023)	37.46	10.66	11.26	25.21	64.54	296.43	161.81
(13122,1763)	73.21	20.22	24.22	49.76	142.53	563.16	421.61
(20402,2703)	120.34	36.20	45.37	84.75	251.29	1195.78	857.66
(29282,3843)	175.81	52.83	66.57	128.42	415.62	2528.67	1445.99
(39762,5183)	250.84	85.08	95.13	185.65	640.37	2362.09	2220.32
(51842,6723)	332.19	128.80	110.23	241.29	886.06	3014.54	3647.90
(65522,8463)	441.99	146.10	144.68	361.41	1192.64	5736.12	5179.45
(80802,10403)	549.64	224.37	215.37	405.63	1641.14	7432.54	7076.79

$\|r_k\|_2 / \|f\|_2 < 10^{-6}$

$\|r_k\|_2 / \|f\|_2 < 10^{-8}$

表 5: (5.2) を利用した反復回数

次元 (n, m)	$\omega=1.0$	$\omega=1.2$	$\omega=2.0$	fixed	Orthomin(2)	$\omega=1.2$	Orthomin(2)
(882,143)	1529	148	240	1597	673	577	801
(3362,483)	189	53	52	212	868	945	1791
(7742,1023)	179	50	53	206	1113	1458	2748
(13122,1763)	177	47	58	208	1337	1393	3745
(20402,2703)	175	51	65	208	1485	1713	4820
(29282,3843)	173	49	63	216	1693	2493	5786
(39762,5183)	173	56	64	217	1872	1632	6870
(51842,6723)	173	64	55	212	1985	1576	7837
(65522,8463)	173	56	55	218	2202	2260	9005
(80802,10403)	171	67	65	219	2313	2346	9988

$\|r_k\|_2/\|f\|_2 < 10^{-6}$ $\|r_k\|_2/\|f\|_2 < 10^{-8}$

表 4-5 は, (5.2) を (2.13) とアルゴリズム 2.2 に利用して打ち切り基準 $\|r_k\|_2/\|f\|_2 < 10^{-6}$ と, 加えて $\omega = 1.2$ については打ち切り基準 $\|r_k\|_2/\|f\|_2 < 10^{-8}$ で計算を実行した場合の計算時間と反復回数を示したものである. また, 比較として逐次反復法において不定値問題についても破綻要因の少ない Orthomin(2) 法の結果を示してある.

表 4-5 の考察として, それぞれの反復回数から $\|r_k\|_2/\|f\|_2 < 10^{-6}$ での収束はとても速ことが分かるが, $\|r_k\|_2/\|f\|_2 < 10^{-8}$ での Orthomin(2) 法では計算時間や反復回数が自然に増加しているのに対して, $\omega = 1.2$ ではそれからの収束が非常に遅いことも分かる. また, $\|r_k\|_2/\|f\|_2 < 10^{-8}$ での fixed の結果も示すべきであったが $\omega = 1.2$ に比べて多量の計算コストを必要とした為に省略したものである [図 3].

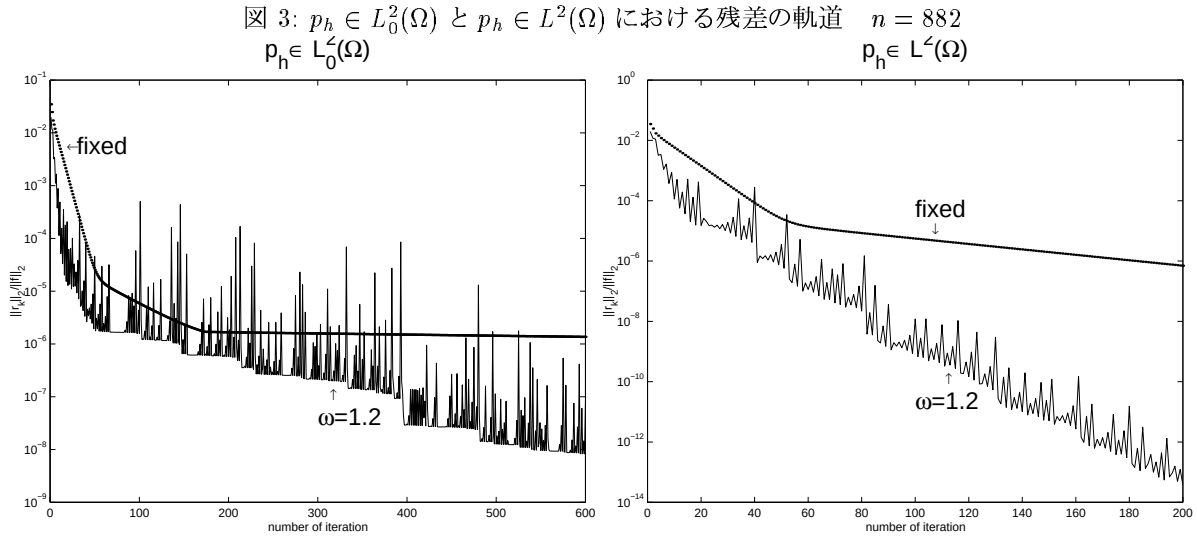


表 4-5 の $\|r_k\|_2/\|f\|_2 < 10^{-8}$ での要因としては, 図 1 から条件数や field of value [定義 2.1] が関係していると推測される. 図 3 は, (4.2) において積分での不定性を処理した場合と残した場合の 2 つの離散化した線形方程式 ($n = 882$) に Uzawa 法を適用した時の反復回数 600 回 (既処理) と 200 回 (未処理) での $\|r_k\|_2/\|f\|_2$ の値をプロットしたものである. この時, 同じ分割幅での全体系の行列の次元は前者が後者よ

り 1 だけ小さく, B の rank についても前者は full-row rank で後者は full-row rank より 1 つ小さなものとなっている. 明らかに, 後者の $S = BA^{-1}B^T + C$ は悪い条件数となる. もちろん, 厳密には zero 固有値を持つことになるが $\text{cond}(S) = \infty$ であるが, Uzawa 法のアルゴリズムと計算機の計算精度を考慮すれば計算の成功が期待される.

図 3 の考察として, fixed ではほとんど変化していないことに対して $\omega = 1.2$ では極端に減少が進んでいることが分かる. これにより, 図 1 左上の悪い条件数の場合が減少量の増加に適していることが確認できる. また, 線形システムを inexact に解いた影響が図 1 左下の停滞しているところに対応した部分に生じ, それを考慮すれば図 1 左下と非常に良く似た軌道を描いていることことも分かる.

表 6: (5.2) を利用した計算時間 (単位: 秒)

次元 (n, m)	$\omega=1.0$	$\omega=1.2$	$\omega=2.0$	fixed	Orthomin(2)	$\omega=1.2$	Orthomin(2)
(882,144)	3.07	0.72	0.94	1.98	2.75	2.74*	3.41
(3362,484)	15.27	3.90	5.00	10.11	22.90	14.11*	29.11
(7742,1024)	38.33	14.83	13.29	24.77	68.71	44.87*	97.55
(13122,1764)	71.84	23.34	20.81	50.91	153.29	85.24*	258.38
(20402,2704)	120.51	39.71	40.21	82.88	233.32	132.81*	497.79
(29282,3844)	178.79	54.65	54.37	127.70	422.32	194.33*	860.18
(39762,5184)	225.19	81.02	94.36	182.95	639.82	319.61*	1376.19
(51842,6724)	336.48	119.52	124.95	239.20	995.81	453.90*	2027.89
(65522,8464)	437.43	120.46	179.99	322.86	1233.89	654.38*	2877.71
(80802,10404)	559.97	210.37	219.04	406.12	1669.13	844.86*	4015.86
$\ r_k\ _2/\ f\ _2 < 10^{-6}$						$\ r_k\ _2/\ f\ _2 < 10^{-8} (-12^*)$	

表 7: (5.2) を利用した反復回数

次元 (n, m)	$\omega=1.0$	$\omega=1.2$	$\omega=2.0$	fixed	Orthomin(2)	$\omega=1.2$	Orthomin(2)
(882,144)	179	41	57	184	407	165*	566
(3362,48)	179	45	58	200	809	172*	1151
(7742,1024)	177	69	61	203	1087	219*	1708
(13122,1764)	175	55	49	207	1292	200*	2242
(20402,2704)	175	55	57	207	1487	191*	2800
(29282,3844)	173	52	51	215	1661	186*	3394
(39762,5184)	173	53	63	217	1888	217*	3893
(51842,6724)	173	60	63	212	2056	235*	4467
(65522,8464)	173	46	70	218	2149	257*	5072
(80802,10404)	171	62	64	219	2357	263*	5586
$\ r_k\ _2/\ f\ _2 < 10^{-6}$						$\ r_k\ _2/\ f\ _2 < 10^{-8} (-12^*)$	

表 6-7 は, 積分での不定性を残した場合の (4.2) に (5.2) を利用して $\omega = 1$ と $\omega = 1.2$ そして $\omega = 2$ でのアルゴリズム 2.4 とアルゴリズム 2.2 を打ち切り基準 $\|r_k\|_2/\|f\|_2 < 10^{-6}$ で計算を実行した場合の計算時間と反復回数を示したものである. また, 表 4-5 に対応するものとして Orthomin(2) 法については打ち切り基準 $\|r_k\|_2/\|f\|_2 < 10^{-8}$, $\omega = 1.2$ については打ち切り基準 $\|r_k\|_2/\|f\|_2 < 10^{-12}$ で計算を実行した場合の計算時間と反復回数を示してある.

表 6-7 の考察として, $\|r_k\|_2/\|f\|_2 < 10^{-6}$ での結果は表 4-5 とほぼ同じであるがそれからの収束に大きな

違いがあることが分かる。もちろん, Orthomin(2) 法についても計算コストの短縮が見られるが, $\omega = 1.2$ については $\|r_k\|_2/\|f\|_2 < 10^{-12}$ としていることに注目すればこの場合の行列には Orthomin(1) 法 ($\omega = 1.2$) を用いた Uzawa 法が有効であることが分かる。

表 8: (5.2) を利用した $(n, m) = (181202, 23104)$ での計算時間 (単位: 秒)

**	$\omega=1.0$	$\omega=1.2$	$\omega=2.0$	fixed	Orthomin(2)	$\omega=1.2$	Orthomin(2)	Chol
n	17958.31	3926.78	6481.07	10094.19	4746.38	12950.18*	12382.09	94.52
$n/2$	1394.13	327.20	572.71	1036.36	4749.98	1277.40*	12386.63	19.34
$\ r_k\ _2/\ f\ _2 < 10^{-6}$						$\ r_k\ _2/\ f\ _2 < 10^{-8} (-10^*)$		

表 9: (5.2) を利用した $(n, m) = (181202, 23104)$ での反復回数

**	$\omega=1.0$	$\omega=1.2$	$\omega=2.0$	fixed	Orthomin(2)	$\omega=1.2$	Orthomin(2)
n	171	39	61	222	3210	143*	8377
$n/2$	171	39	69	222	3213	159*	8387
$\ r_k\ _2/\ f\ _2 < 10^{-6}$						$\ r_k\ _2/\ f\ _2 < 10^{-8} (-10^*)$	

この中では, symmmd を利用したガウスの消去法で線形システムを解いているが, これは次元が大きくなるほど計算コストは 3 乗的に増加し途中で打ち切ることができない。また, 計算はメモリー不足で失敗する可能性もある。それに比べ, (内) 反復法では 2 乗的な増加にとどまり打ち切りも可能である。しかし, この問題は多少無責任であるが逆に利用すればよいであろう。その 1 つとして, Uzawa 法の有効性を示す。

ここで用いたモデル問題において, 行列 A の線形システムはその構成から半分の次元の行列として考えることができる [付録 (2)]。これは, 比較として示した Orthomin(2) 法等の (内) 反復法ではメモリー管理程度の役割しか果たさないが, Uzawa 法では半分の次元の線形システムを解く訳であるので表 3 からも分かるようにかなりの計算コストの短縮が期待される。もちろん, ガウスの消去法でなくても正定値線形システムの反復解法でも同様のことが言える。

表 8-9 は, 表 6-7 の延長として $(n, m) = (181202, 23104)$ の場合の行列 A の線形システムを **: n と $n/2$ 次元で解いた時の計算時間と反復回数を示したものである。但し, $\omega = 1.2$ については打ち切り基準 $\|r_k\|_2/\|f\|_2 < 10^{-6}$ と $\|r_k\|_2/\|f\|_2 < 10^{-10}$ での結果である。

表 8 から **: n に比べ $n/2$ の場合では計算時間が約 10 分の 1 となっていることが分かる。また, 表 9 の反復回数の違いは丸め誤差によるものと推測される。

5.2 精度保証

表 10: symmmd を利用した計算時間 (単位: 秒)

次元 (n, m)	系 3.2	系 4.1	方法 3.1	方法 3.2	方法 3.3	$(U^{-1}L^{-1}b)$
(882,143)	0.16	0.17	1.42	3.02	3.08	(2.12)
(3362,483)	1.21	1.81	失敗	148.25	150.41	(116.79)
(7742,1023)	3.73	7.03	失敗	2416.23	2421.64	(1277.54)
(13122,1763)	9.34	20.54	—	—	—	—
(20402,2703)	18.95	67.01	—	—	—	—
(29282,3843)	34.22	195.53	—	—	—	—

表 11: symmmd を利用した誤差評価 (e : log)

次元 (n, m)	系 3.2 $\{\tilde{x} \ \tilde{y}\}$		系 4.1 $\{\tilde{x} \ \tilde{y}\}$		方法 3.1	方法 3.2	方法 3.3
(882,143)	{3.2511e-7	1.5096e-7}	{1.9805e-10	1.1559e-9}	1.5140e-7	1.6845e-10	3.2540e-10
(3362,483)	{3.3251e-5	8.0669e-6}	{5.2743e-9	2.6122e-8}	失敗	4.3741e-10	8.2598e-10
(7742,1023)	{5.4902e-4	9.0186e-5}	{3.7167e-8	1.5995e-7}	失敗	9.8605e-10	1.9384e-9
(13122,1763)	{4.2778e-3	5.3121e-4}	{1.7391e-7	6.8076e-7}	—	—	—
(20402,2703)	{2.5567e-2	2.5521e-3}	{6.1515e-7	2.1337e-6}	—	—	—
(29282,3843)	{8.3737e-2	6.9881e-3}	{1.3963e-6	4.3974e-6}	—	—	—

表 10-11 は, symmmd を利用して LU -分解とガウスの消去法で求めた近似解 [表 1-2] を用いて系 3.2 と系 4.1 では $\|x^* - \tilde{x}\|_\infty$ と $\|y^* - \tilde{y}\|_\infty$ そして方法 3.1-3.3 では $\|z^* - \tilde{z}\|_\infty$ の精度保証の計算時間とその評価を示したものである. また, 表 10 の $(U^{-1}L^{-1}b)$ は方法 3.2 の計算途中で求めることになる U^{-1} と L^{-1} を用いて近似解を求めた場合に必要 (相当) とする計算時間であり, 方法 3.3 については計算の高速化とメモリの節約の為に方法 3.2 と同じ計算方法を用いている [14][16]. 更に, この場合の行列 A はモノトーンで行列あるので A^{-1} の評価については CG 法を用いて打ち切り基準を残差 s が $\|s\|_2 < 10^{-3}$ 以下となるように計算を行ってある [補題 3.1]. 加えて, $(BB^T)^{-1}$ についてはコレスキー分解を行い方法 3.2 の計算手法を用いて評価を行っている. ここで, $\max\{\|\tilde{x}\|_\infty, \|\tilde{y}\|_\infty\} \approx 0.5$ であった. すなわち, 相対誤差は表 11 の絶対誤差を約 2 倍したものとなる [10].

表 10-11 の考察として, 系 4.1 が系 3.2 より安定していることが確認できる. しかし, 方法 3.2-3.3 に比べ遥かに少ない計算コストでの評価を行うことができる反面, 評価としては劣っていることも分かる. よって, 更なる前処理の適用が必要である. 注意として, この評価は BB^T への前処理を行い安定を導いている. そして, 系 3.2 と系 4.1 の計算には同じ近似解を用いている. ゆえに, 系 3.2 と系 4.1 は同じ近似解への精度保証であり, どちらを利用しても問題ない. すなわち, 計算時間についての多少のコストを許容すれば, 逆に A への前処理を考えることにより単独に異なる評価も可能である. 従って, 問題により異なるがこれは更なる精度向上の前処理を見つけることが簡素化されたことを意味している.

また, 方法 3.1 の失敗の要因は特に LU -分解によって得られた行列 U の特異値が非常に小さかった為に検証が失敗した.

5.3 まとめ

この反復法の数値結果から興味深いことが分かる. それは, 表 1-2 の結果が $\tau = 1$ とかなり inexact であり, 表 4-5, 6-7 はガウスの消去法を用いたかなり exact な結果であることであるにもかかわらず, 表 1 と表 4 からどちらも同程度の反復回数となっていることである. 後者の場合, 計算機の計算精度とほぼ同値な残差を持つ解を導くことになるが, これを反復法で導こうとすれば表 1 で示した計算時間よりも多くの時間を必要とすることは必至である. また, 表 8-9 のように行列 A がとてもよい性質をもっている場合には更なる高速化が見込まれる. つまり, これは鞍点型問題への (inexact) Uzawa 法の有効性を示すものであり, より高速に (正定値) 線形システムを解く数値解法またはソフトウェアの研究や開発により一層の応用の期待を残すものと言える.

これからの問題としては, 非線形鞍点型問題への応用である. 特に, 精度保証については定理 3.1 の更なる前処理による改良と, 無限次元での考察が今後の課題である.

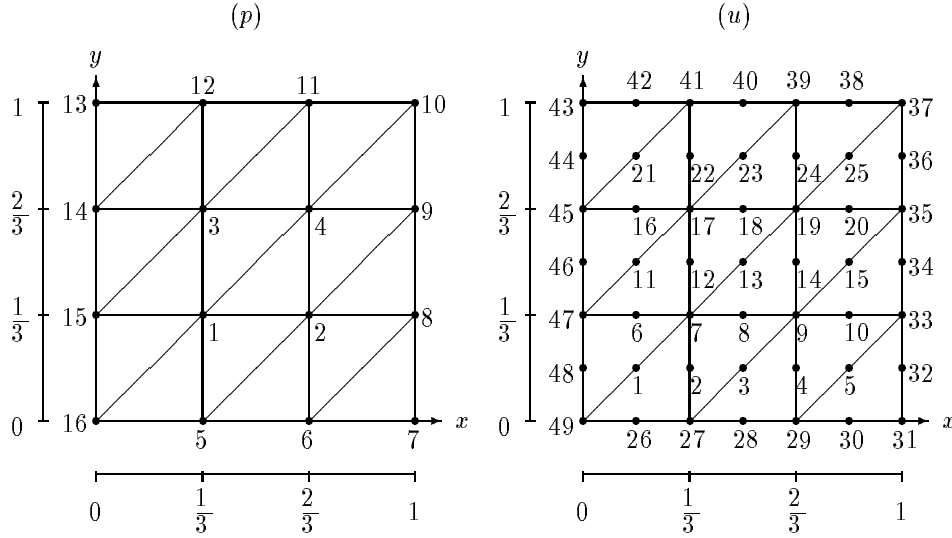
参考文献

- [1] O. Axelsson, Iterative Solution Methods, Cambridge University Press, London, (1996).
- [2] J. Bramble, J. Pasciak and A. Vassilev, Analysis of the inexact Uzawa algorithm for saddle point problems, SIAM J. Numer. Anal. 34 (1997), pp. 1072-1092.
- [3] X. Chen, Global and superlinear convergence of inexact Uzawa methods for saddle point problems with nondifferentiable mappings, SIAM J. Numer. Anal. 35 (1998) pp. 1130-1148.
- [4] X. Chen, On preconditioned Uzawa methods and SOR methods for saddle point problems, J. Comp. Appl. Math. 100 (1998) pp. 207-224.
- [5] X. Chen and K. Hashimoto, Numerical validation of solutions of saddle point matrix equations, 応用数学合同研究集会報告集 (2001) pp. 141-144.
- [6] H. C. Elman and G. H. Golub, Inexact and preconditioned Uzawa algorithm for saddle point problems, SIAM J. Numer. Anal. 31 (1994), pp. 1645-1661.
- [7] A. Greenbaum, Iterative Methods for Solving Linear Systems (Frontiers in Applied Mathematics Vol.17), SIAM, Philadelphia, PA., (1997).
- [8] G. A. Horn, C. R. Johnson, Topics in Matrix Analysis, Cambridge University Press, London, (1991).
- [9] R. Kress, Numerical Analysis (Graduate Texts in Mathematics 181), Springer-Verlag New York, (1998).
- [10] T. Ogita, S. Oishi and Y. Ushiro, Fast verification of solutions monotone matrix equations, Comp. [Suppl] 15, (2001) pp. 175-187.
- [11] S. M. Rump, INTLAB-INTerval LABoratory, Technical report, Inst. f. Informatik , Technical University Hamburg Harburg, (1998).
- [12] S. M. Rump, Validated solution of large linear systems, Comp. [Suppl] 9, (1993) pp. 191-212.
- [13] Y. Watanabe, N. Yamamoto and M. T. Nakao, A numerical verification method of solutions for the Navier-Stokes equations, Reliable Comp. 5, (1999), pp. 347-357
- [14] 大石進一, 精度保証付き数値計算 (現代非線形科学シリーズ 6), コロナ社, (2000).
- [15] 菊地文雄, 有限要素法の数理・数学的基礎と誤差解析 (計算力学とCAEシリーズ 13), 培風館, (1994).
- [16] 中尾充宏, 山本野人, 精度保証付き数値計算・コンピュータによる無限への挑戦 (チュートリアル/応用数理の最前線), 日本評論社, (1998).
- [17] 松永奈美, 2次元定常 Stokes 問題に対する Mixed Finite Element Methods, 愛媛大学大学院理学研究科修士論文, (1993).

付録 要素行列の計算

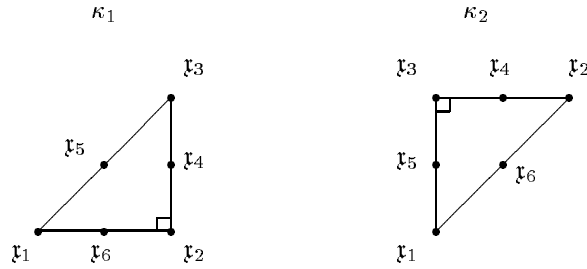
ここでは, $n_{xy} := n_x = n_y = 2$ の場合について示す.

図 4: $n_{xy} = 2$ での $(p) : p$ の分割と接点配置, $(u) : u_1, u_2$ の分割と接点配置



これは, 次の 2 つの場合を考えることとなる.

図 5: 三角形分割の 2 つの要素形状と接点配置



また, 各 $\mathbf{x}_i, i = 1, 2, 3$ での 1 次基底関数を $\psi_i^\kappa = \psi_i^\kappa(x, y)$ とする時, 各 $\mathbf{x}_i, i = 1, \dots, 6$ での 2 次基底関数を次により定義する.

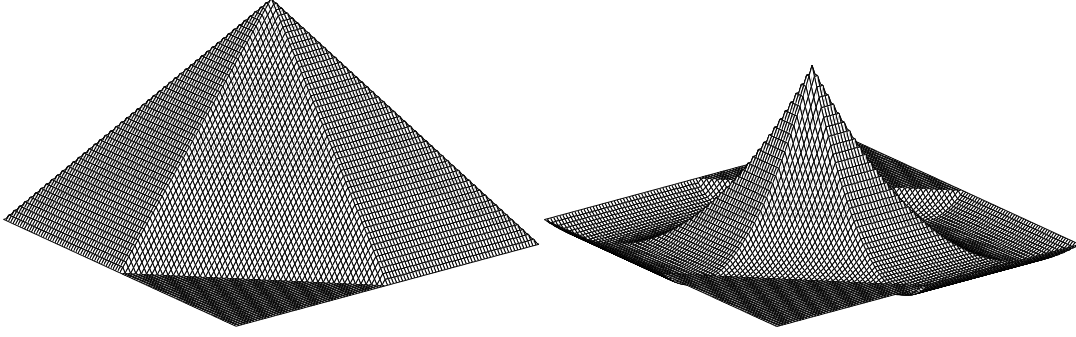
$$\begin{aligned} \phi_1^\kappa(x, y) &= \psi_1^\kappa(2\psi_1^\kappa - 1), & \phi_2^\kappa(x, y) &= \psi_2^\kappa(2\psi_2^\kappa - 1), & \phi_3^\kappa(x, y) &= \psi_3^\kappa(2\psi_3^\kappa - 1), \\ \phi_4^\kappa(x, y) &= 4\psi_2^\kappa\psi_3^\kappa, & \phi_5^\kappa(x, y) &= 4\psi_3^\kappa\psi_1^\kappa, & \phi_6^\kappa(x, y) &= 4\psi_1^\kappa\psi_2^\kappa. \end{aligned}$$

但し, 1 次基底関数は $\psi_i^\kappa = \delta_{\mathbf{x}_i}^{\mathbf{x}_j}$ を満たす連続関数とする. ここに, $\delta_{\mathbf{x}_i}^{\mathbf{x}_j}$ はクロネッカーのデルタである.

ストークス方程式において, このような流速での 2 次基底関数と圧力での 1 次基底関数はよく用いられる組み合わせである.

すなわち, 各接点において基底関数は図 6 のようである.

図 6: 頂点における (左) : 1 次基底関数, (右) : 2 次基底関数



よって, κ_1, κ_2 の各要素行列は次により与えられる.

$$A_1^{\kappa_1} = \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 3 & 1 & 0 & 0 & 0 & -4 \\ 1 & 6 & 1 & -4 & 0 & -4 \\ 0 & 1 & 3 & -4 & 0 & 0 \\ 0 & -4 & -4 & 16 & -8 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -8 & 16 & -8 \\ -4 & -4 & 0 & 0 & -8 & 16 \end{pmatrix}, \quad A_2^{\kappa_1} = \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 3 & 1 & 0 & 0 & 0 & -4 \\ 1 & 6 & 1 & -4 & 0 & -4 \\ 0 & 1 & 3 & -4 & 0 & 0 \\ 0 & -4 & -4 & 16 & -8 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -8 & 16 & -8 \\ -4 & -4 & 0 & 0 & -8 & 16 \end{pmatrix},$$

$$B_1^{\kappa_1} = \frac{h}{6} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 2 & 0 \end{pmatrix}, \quad B_2^{\kappa_1} = \frac{h}{6} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & -2 \\ 0 & -1 & 0 & 1 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 \end{pmatrix}.$$

$$A_1^{\kappa_2} = \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 3 & 0 & 1 & 0 & -4 & 0 \\ 0 & 3 & 1 & -4 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 6 & -4 & -4 & 0 \\ 0 & -4 & -4 & 16 & 0 & -8 \\ -4 & 0 & -4 & 0 & 16 & -8 \\ 0 & 0 & 0 & -8 & -8 & 16 \end{pmatrix}, \quad A_2^{\kappa_2} = \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 3 & 0 & 1 & 0 & -4 & 0 \\ 0 & 3 & 1 & -4 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 6 & -4 & -4 & 0 \\ 0 & -4 & -4 & 16 & 0 & -8 \\ -4 & 0 & -4 & 0 & 16 & -8 \\ 0 & 0 & 0 & -8 & -8 & 16 \end{pmatrix},$$

$$B_1^{\kappa_2} = \frac{h}{6} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & -2 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 \end{pmatrix}, \quad B_2^{\kappa_2} = \frac{h}{6} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & -2 & 2 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 1 & -1 & 1 \end{pmatrix}.$$

但し, 各 κ_1, κ_2 における要素行列は次である.

$$A^{\kappa_i} = \begin{pmatrix} A_1^{\kappa_i} \\ A_2^{\kappa_i} \end{pmatrix}, \quad B^{\kappa_i} = (B_1^{\kappa_i}, B_2^{\kappa_i}), \quad i = 1, 2. \quad (2)$$

また, 安定型ペナルティ法のために係数行列 C の要素行列を示しておく.

$$C^{\kappa_1} = C^{\kappa_2} = \frac{h^2}{24} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{pmatrix}.$$

本文中で用いる Conjugate Gradient (CG) 法と Orthomin(j) 法 ($j = 1, 2$) のアルゴリズムを示しておく.

アルゴリズム (Conjugate Gradient Method for linear matrix equation $H z = b$)

Given an initial guess z_0
 Compute $r_0 = b - H z_0$ and set $q_0 = r_0$
 For $k = 0$ until convergence
 Compute $H q_k$
 Set $z_{k+1} = z_k + \alpha_k q_k$ where $\alpha_k = \frac{(r_k, r_k)}{(q_k, H q_k)}$
 Compute $r_{k+1} = r_k - \alpha_k H q_k$
 Set $q_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k q_k$ where $\beta_k = \frac{(r_{k+1}, r_{k+1})}{(r_k, r_k)}$

実際の計算には、同値なものとして次の係数が有効である.

$$\alpha_k = \frac{(r_k, q_k)}{(q_k, H q_k)}, \quad \beta_k = \frac{(r_{k+1}, H q_k)}{(q_k, H q_k)}.$$

例 2.1 において、同精度の数値結果を求める際、計算時間と反復回数共におよそ 10 倍程度の違いがあった.

アルゴリズム (parameter-Orthomin(1) Method for linear matrix equation $H z = b$)

Given an initial guess z_0
 Compute $r_0 = b - H z_0$
 For $k = 0$ until convergence
 Compute $H r_k$
 Set $z_{k+1} = z_k + \alpha_k^\omega r_k$ where $\alpha_k^\omega = \frac{(r_k, H r_k)}{(H r_k, H r_k)} / \omega$ ω : parameter
 Compute $r_{k+1} = r_k - \alpha_k^\omega H r_k$

アルゴリズム (Orthomin(2) Method for linear matrix equation $H z = b$)

Given an initial guess z_0
 Compute $r_0 = b - H z_0$ and set $q_0 = r_0$
 For $k = 0$ until convergence
 Compute $H q_k$
 Set $z_{k+1} = z_k + \alpha_k q_k$ where $\alpha_k = \frac{(r_k, H q_k)}{(H q_k, H q_k)}$
 Compute $r_{k+1} = r_k - \alpha_k H q_k$
 Set $q_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k q_k$ where $\beta_k = \frac{(H r_{k+1}, H q_k)}{(H q_k, H q_k)}$

修 士 論 文 要 旨

論 文	入 学 年 度	平 成 12 年 度	専 攻	数理・ 情報システム学専攻	講 座	数理解析 講座
提 出 者	氏 名	橋本 弘治	学 生 番 号	S009308	指 導 教 官	陳 小君
論 文 題 目	鞍点型問題の数値解法と精度保証					
英 文 題 目	The Numerical Solutions and Verification Methods for Saddle Point Problems					

この修士論文は、鞍点型問題の数値解法と精度保証の研究である。鞍点型問題は多くの数理モデルから生じるものであり、非常に重要なものである。また、本論文では非線形鞍点型問題を考える上で基本となる線形の場合について考えている。

近年の急速な計算機の発達により、有限次元での数値解法や精度保証付き数値計算法などの研究が飛躍的に進み、時として数値的な結果を求めるだけでなく無限次元の解析に大きな貢献を果たしている。よって、大規模な連立方程式の高速な数値解法や精度保証付き数値計算法が現在注目されている。

この中では、次の鞍点型問題について考える。

$$\begin{pmatrix} A & B^T \\ B & -C \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix}. \quad (1)$$

但し、 A は $n \times n$ 正定値対称行列、 B は $m \times n$ 行列、 C は $m \times m$ 半正定値対称行列であり、 x と f は n 次ベクトル、 y と g は m 次ベクトルである ($n \geq m$)。

鞍点型問題 (1) の係数行列は正と負の両方の固有値を持つ不定値対称行列であり、その不定性がこの問題の難しさとなっている。

2 章では、数値解法について述べる。正定値対称問題に対する数値解法は様々に研究が成され、例えば良く知られているものとして Conjugate Gradient 法や Orthomin(j) 法などの計算上とても高速なものがある。これらの方法は、反復を行う度に直交化空間を広げていくものであり、その為に直交化ベクトルを新たに構成するものである。一般の不定値対称問題に対する数値解法は正定値対称問題と比較すると理論的に難しく、収束速度も遅いものである。その中で、(1) の有効な反復計算法として Uzawa 型法が良く知られている。これは外反復を用いるものであり、その収束速度は固有値に依存するパラメータによって決まるものである。実は、Uzawa 法は外反復を用いることにより理論的には正定値対称行列として考えることになる。しかし、外反復を用いることで上に示したような方法の有効性が構成する直交化ベクトルの関連付けの為に失われ、これらの方法の適用は難しくなる。そこで、これらに関連した初歩的な方法としてこの問題を生じない機能的に計算されたパラメータを用いる最速降下法や Orthomin(1) 法に注目し、特に Orthomin(1) 法を Uzawa 法に適用した場合の改良と平均的な意味での有効性について述べていく。

3 章では、精度保証について述べる。有限次元での連立線形方程式に対する精度保証付き数値計算法は、理論的な部分においては終結したと言われている。しかし、実用的な部分については現在改良がされており、特に鞍点型問題 (1) に対する精度保証は未だ草創期である。(1) を全体系として考えるならば、一般対称問題の精度保証付き数値計算法を利用せざるを得ない。これは、非常に計算コストを必要とするものでありメモリー管理が重要となる。それに対して、正定値対称問題ではシンプルなものとしてはコレスキー分解を利用した低メモリーでの精度保証や、場合によっては逐次反復法を利用した高速精度保証などその研究結果が近年発表されている。そこで、鞍点型問題 (1) の新しい精度保証として評価対象となる行列を分離することにより、不定値対称行問題である (1) の精度保証を正定値対称問題の精度保証へと変換する定理を与える。

4 章では、モデル問題として有限要素法による離散化ストークス方程式を紹介し、5 章でこの数値結果を示していく。

(注) 和文又は英文で記載すること。